UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

PROGRAMA UNIVERSIDAD VIRTUAL

SOLUCIONARIO CAPÍTULO III

LIBRO: BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

GIRONTZAS V. REKLAITIS

POR:

ING. QUÍMICO. BEN - HUR VALENCIA VALENCIA

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

SEDE MANIZALES

JULIO DE 2005

PRESENTACION

Luego de la aparición del texto de Balances de Materia y Energía del Doctor Girontzas V. Reklaitis, en 1986, no ha habido ningún texto nuevo en el área, ni suyo ni de ningún otro autor, que trate de manera tan magistral el análisis de los Balances.

El tratamiento matemático propuesto es completamente general y permite que el resolver problemas de Balance de Materia y Energía pase de arte a Ciencia, ocupando por ello – al lado de otros autores - un lugar preferencial en el desarrollo del área, vital para el estudio de la Ingeniería Química.

Esta Segunda Edición del SOLUCIONARIO del Capítulo III corrige algunos errores de la Edición anterior y, lo que es más importante, muestra el uso de programas para calculadoras que permiten resolver de una manera rápida los problemas de Balances de Materia.

A la forma tradicional de resolver los problemas de la anterior Edición se adiciona la solución utilizando el programa Solvesys de la calculadora Hewlett Packard 48-GX, mostrando lo valioso de esta herramienta en la solución de problemas. Este Solucionario lo complementa el trabajo sobre SOLUCION DE PROBLEMAS DE BALANCES DE MATERIA Utilizando la Hewlett Packard 48GX, 49, en el que se muestra la forma de utilizar el Programa y las recomendaciones para su aplicación en el planteamiento del Sistema de Ecuaciones de Balance, que puede consultarse en la página _____.

Como se verá en la introducción, se hace mayor énfasis en la Estrategia de Solución, en la Confirmación de los Grados de Libertad como una herramienta útil en el planteamiento de la Estrategia de Solución y la utilización de la Tabla de Balance en los problemas complejos

El presente Solucionario, fruto de mi experiencia de 28 años en la cátedra de Balances de Materia y Energía, muestra una metodología de solución a partir de las ideas del profesor Reklaitis y lo presenta a sus estudiantes como un material de apoyo que les permita desarrollar y fijar los conceptos básicos en el estudio de los Balances de Materia y Energía.

BEN-HUR VALENCIA V.

Manizales, Julio del 2005.

INTRODUCCION

En la solución de los problemas se muestra la Reconfirmación de la Tabla de Grados de Libertad como una forma de poder analizar de manera cualitativa cuáles son las incógnitas y cuáles las ecuaciones para cada una de las unidades, y aún para el proceso completo. Además, la Reconfirmación se utiliza para mostrar de una manera cualitativa, también, el desarrollo de la Estrategia de solución.

Lo anterior se explicará, con el problema 2.26:

Su **Tabla de Grados de Libertad** es:

	Abs.	**Destilador**	**Divisor**	**Agotador**	**Mez.**	**Proceso**	**Global**
NVI	12	9	9	7	3	26	12
NBMI	4	3	3	3	1	14	4
NFC	0	0	0	0	0	0	0
NCC	3 (+1)	2	1	2	0	6	5
NRC R_1	–	–	1	–	–	1	–
R_2	–	–	–	–	–	1	1
R_3	–	–	–	–	–	1	1
R_4	–	–	2	–	–	2	–
G de L	**4**	**4**	**2**	**2**	**2**	**1**	**1**

De manera cuantitativa puede apreciarse los Grados de Libertad de cada una de las Unidades: así por ejemplo, el Destilador: 4 y el Agotador: 2.

Pero como se muestra en la Reconfirmación de la Tabla de Grados de Libertad que aparece a continuación::

Absorbedor: Incógnitas = 8 (N^1, N^2, N^3, $x^3_{H_2S}$, N^4, N^5, $x^5_{CO_2}$, $x^5_{H_2S}$)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 4

Destilador:	Incógnitas	=	7 (N^5, $x^5_{CO_2}$, $x^5_{H_2S}$, N^6, $x^6_{CO_2}$, N^7, $x^7_{H_2S}$)
	Ecuaciones	=	3 (balances)
	G de L	=	4
Divisor:	Incógnitas	=	8 (N^3, $x^3_{CO_2}$, $x^3_{H_2S}$, N^7, $x^7_{CO_2}$, $x^7_{H_2S}$, N^8, $x^8_{H_2S}$)
	Ecuaciones	=	3 (balances) + 3 (R_1, R_4)
	G de L	=	2
Agotador:	Incógnitas	=	5 (N^8, $x^8_{H_2S}$, N^9, N^{10}, $x^{10}_{CO_2}$)
	Ecuaciones	=	3 (balances)
	G de L	=	2
Mezclador:	Incógnitas	=	3 (N^4, N^9, N^{11})
	Ecuaciones	=	1 (balances)
	G de L	=	2
Global:	Incógnitas	=	7 (N^1, N^2, N^6, $x^6_{CO_2}$, N^{10}, $x^{10}_{CO_2}$, N^{11})
	Ecuaciones	=	4 (balances) + 2 (R_2, R_3)
	G de L	=	1

no solamente se conocen esos valores, sino que muestra CUÁLES son las incógnitas y CUÁLES son las ecuaciones que originan esos Grados de Libertad.

Su utilización en la Estrategia de Solución es análoga. El problema tiene la siguiente estrategia:

Estrategia de Solución:

1. Tomando Base de Cálculo en el Proceso Global y resolviéndolo sus balances (se asumió que los porcentajes son molares) se conocen: N^{1}, N^{2}, N^{6}, $x^{6}_{CO_2}$, N^{10}, $x^{10}_{CO_2}$ y N^{11}. Se agota el balance de Inertes.

2. Actualizando Grados de Libertad se encuentra que:

Absorbedor:	G de L A	=	4 – 2 (N^{1}, N^{2}) + 1 (Balance de Inertes)
		=	3
Destilador:	G de L A	=	4 – 1 (N^{6}) – 1 ($x^{6}_{CO_2}$) = 2
Agotador:	G de L A	=	2 – 1 (N^{10}) – 1 ($x^{10}_{CO_2}$) = 0
Mezclador:	G de L A	=	2 – 1 (N^{11}) = 1

Sí en este momento consideramos la Reconfirmación de Grados de Libertad para las Unidades actualizadas, DESCONTANDO en cada una de ellas las incógnitas conocidas tendremos de nuevo una información CUALITATIVA de los Grados de Libertad con que quedan estas Unidades (se ponen en negrilla y subrayadas en la Reconfirmación inicial):

Absorbedor:	Incógnitas	=	6 (**$\underline{N^{1}, N^{2}}$**, N^{3}, $x^{3}_{H_2S}$, N^{4}, N^{5}, $x^{5}_{CO_2}$, $x^{5}_{H_2S}$)
	Ecuaciones	=	3 (balances) – **1 (Balance agotado)**
	G de L	=	3
Destilador:	Incógnitas	=	5 (N^{5}, $x^{5}_{CO_2}$, $x^{5}_{H_2S}$, **$\underline{N^{6}, x^{6}_{CO_2}}$**, N^{7}, $x^{7}_{H_2S}$)
	Ecuaciones	=	3 (balances)
	G de L	=	2
Agotador:	Incógnitas	=	3 (N^{8}, $x^{8}_{H_2S}$, N^{9}, **N^{10}, $x^{10}_{CO_2}$**)
	Ecuaciones	=	3 (balances)
	G de L	=	0

Mezclador: Incógnitas = 2 (N^4, N^9, $\underline{\mathbf{N^{11}}}$)

Ecuaciones = 1 (balances)

G de L = 1

En la Estrategia se resuelve a continuación el absorbedor ya que encontramos un sistema con tres ecuaciones de Balance y 3 incógnitas (N^8, $x^8_{H_2S}$, N^9)

Un análisis similar a cualquier otra Unidad nos enseña cuáles son las incógnitas, las ecuaciones y los Grados de Libertad resultantes:

El análisis del Destilador muestra que tiene, en este momento: Cinco Incógnitas (N^5, $x^5_{CO_2}$, $x^5_{H_2S}$, N^7, $x^7_{H_2S}$) y 3 ecuaciones de Balance, siendo sus Grados de Libertad de 2.

3.1.

a. Escriba una reacción química balanceada para la reacción de 1 mol de $C_8H_{12}S_2$ con O_2 para producir CO_2, H_2O y SO_2.

b. Calcule la velocidad de producción de todas las sustancias, si se hacen reaccionar 2 moles/h de $C_8H_{12}S_2$ con una cantidad estequiométrica de O_2.

c. Calcule la velocidad de la reacción.

SOLUCIÓN

a. Escriba una reacción química balanceada para la reacción de 1 mol de $C_8H_{12}S_2$ con O_2 para producir CO_2, H_2O y SO_2.

La ecuación balanceada es:

$$C_8H_{12}S_2 + 13\ O_2 \longrightarrow 8\ CO_2 + 6\ H_2O + 2\ SO_2$$

b. Calcule la velocidad de producción de todas las sustancias, si se hacen reaccionar 2 moles/h de $C_8H_{12}S_2$ con una cantidad estequiométrica de O_2.

Con base en la simbología utilizada y la estequiometría de la reacción:

$$N_{C_8H_{12}S_2}^{Entrada} = 2\frac{mol}{h} \qquad y \qquad N_{O_2}^{Entrada} = 26\frac{mol}{h}$$

A partir de las ecuaciones de definición:

$$R_{C_8H_{12}S_2} = N_{C_8H_{12}S_2}^{Salida} - N_{C_8H_{12}S_2}^{Entrada} = 0 - 2 = -2\frac{mol}{h}$$

$$R_{O_2} = N_{O_2}^{Salida} - N_{O_2}^{Entrada} = 0 - 26 = -26\frac{mol}{h}$$

$$R_{CO_2} = N_{CO_2}^{Salida} - N_{CO_2}^{Entrada} = 16 - 0 = 16\frac{mol}{h}$$

$$R_{H_2O} = N_{H_2O}^{Salida} - N_{H_2O}^{Entrada} = 12 - 0 = 12\frac{mol}{h}$$

$$R_{SO_2} = N_{SO_2}^{Salida} - N_{SO_2}^{Entrada} = 4 - 0 = 4\frac{mol}{h}$$

c. Calcule la velocidad de la reacción.

Los coeficientes estequiométricos para reactivos y productos son:

$$\sigma_{C_8} = -1 \qquad \sigma_{O_2} = -13 \qquad \sigma_{CO_2} = 8 \qquad \sigma_{H_2O} = 6 \qquad \sigma_{SO_2} = 2$$

La velocidad de reacción es:

$$r = \frac{R}{\sigma} = \frac{-2}{-1}\frac{\text{mol}}{\text{h}} = \frac{-26}{-13}\frac{\text{mol}}{\text{h}} = \frac{16}{8}\frac{\text{mol}}{\text{h}} = \frac{12}{6}\frac{\text{mol}}{\text{h}} = \frac{4}{2}\frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$r = 2\,\frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

3.2. La combustión de C_3H_6 hasta CO_2 y H_2O puede describirse por cualquiera de las reacciones:

$$\mathbf{C_3H_6 + \tfrac{9}{2}\,O_2 \longrightarrow 3\,CO_2 + 3\,H_2O}$$

o la reacción:

$$\mathbf{2\,C_3H_6 + 9\,O_2 \longrightarrow 6\,CO_2 + 6\,H_2O}$$

Suponga que se hacen reaccionar 10 moles/h de C_3H_6 con 50 moles/h de O_2, lográndose la conversión completa de C_3H_6.

Calcule las velocidades de reacción que se obtienen con cada reacción.

Explique de qué manera se relacionan las dos velocidades y por qué.

SOLUCIÓN

Para la primera reacción:

$$C_3H_6 + \tfrac{9}{2}\,O_2 \longrightarrow 3\,CO_2 + 3\,H_2O$$

Los coeficientes estequiométricos son:

$$\sigma_{C_3H_6} = -1 \qquad \sigma_{O_2} = -\tfrac{9}{2} \qquad \sigma_{CO_2} = 3 \qquad \sigma_{H_2O} = 3$$

Por tanto:

$$N_{C_3H_6}^{Entrada} = 10\ \frac{mol}{h} \qquad N_{O_2}^{Entrada} = 50\ \frac{mol}{h}$$

$$N_{CO_2}^{Salida} = 30\ \frac{mol}{h} \qquad N_{H_2O}^{Salida} = 30\ \frac{mol}{h} \qquad N_{O_2}^{Salida} = (50-45) = 5\ \frac{mol}{h}$$

La velocidad de reacción es:

$$r_1 = \frac{0-10}{-1}\frac{mol}{h} = \frac{5-50}{-4.5}\frac{mol}{h} = \frac{30-0}{3}\frac{mol}{h} = \frac{30-0}{3}\frac{mol}{h}$$

$$r_1 = 10\ \frac{mol}{h}$$

Para la segunda reacción:

$$2\ C_3H_6 \quad + \quad 9\ O_2 \quad \longrightarrow \quad 6\ CO_2 \quad + \quad 6\ H_2O$$

Los coeficientes estequiométricos son:

$$\sigma_{C_3H_6} = -2 \qquad \sigma_{O_2} = -9 \qquad \sigma_{CO_2} = 6 \qquad \sigma_{H_2O} = 6$$

La velocidad de reacción es:

$$r_2 = \frac{0-10}{-2}\frac{mol}{h} = \frac{5-50}{-9}\frac{mol}{h} = \frac{30-0}{6}\frac{mol}{h} = \frac{30-0}{6}\frac{mol}{h}$$

$$r_2 = 5\ \frac{mol}{h}$$

Se encuentra que $r_1 = 2\ r_2$ porque la segunda reacción se obtiene multiplicando la primera por 2, lo que significa que sus coeficientes estequiométricos serán el doble.

Como las dos reacciones explican la transformación química de la misma cantidad de propano (10 mol/h), la velocidad de la segunda reacción debe ser la mitad de la velocidad de la primera.

3.3. Considere la reacción:

$$3\ C_2H_5OH + 2\ Na_2Cr_2O_7 + 8\ H_2SO_4 \longrightarrow 3\ CH_3COOH + 2\ Cr_2(SO_4)_3 + 2\ Na_2SO_4 + 11\ H_2O$$

a. Si una alimentación al reactor tiene la composición (porcentaje en mol) de 20 % de C_2H_5OH, 20 % de $Na_2Cr_2O_7$ y el resto H_2SO_4, ¿cuál es el reactivo limitante?

b. ¿Si se alimenta a un reactor 230 kg/h de C_2H_5OH, qué flujos de alimentación de los otros dos reactivos serían necesarios para tener una mezcla estequiométrica de alimentación?

SOLUCIÓN

a. Si una alimentación al reactor tiene la composición (porcentaje en mol) de 20 % de C_2H_5OH, 20 % de $Na_2Cr_2O_7$ y el resto H_2SO_4, ¿cuál es el reactivo limitante?

La reacción es:

$$3\ C_2H_5OH + 2\ Na_2Cr_2O_7 + 8\ H_2SO_4 \longrightarrow 3\ CH_3COOH + 2\ Cr_2(SO_4)_3 + 2\ Na_2SO_4 + 11\ H_2O$$

Para una mezcla de alimentación de 100 moles, las cantidades molares de etanol, cromato y sulfúrico son 20, 20 y 60 respectivamente.

Los coeficientes estequiométricos son:

$$\sigma_{C_2H_5OH} = -3 \qquad \sigma_{Na_2Cr_2O_7} = -2 \qquad \sigma_{H_2SO_4} = -8$$

Al calcular la relación entre el número de moles que entra y el coeficiente estequiométrico para cada uno de los reactivos se tiene que:

$$\frac{N^{entrada}_{C_2H_5OH}}{\sigma_{C_2H_5OH}} = \frac{20}{3} = 6.67 \qquad \frac{N^{entrada}_{Na_2Cr_2O_7}}{\sigma_{Na_2Cr_2O_7}} = \frac{20}{2} = 10$$

$$\frac{N^{entrada}_{H_2SO_4}}{\sigma_{H_2SO_4}} = \frac{60}{8} = 7.50$$

Comparándolas entre ellas, la menor de las tres relaciones es 6.67, o sea que el reactivo limite es el etanol.

b. ¿Si se alimenta a un reactor 230 kg/h de C_2H_5OH, qué flujos de alimentación de los otros dos reactivos serían necesarios para tener una mezcla estequiométrica de alimentación?

C_2H_5OH que entra = 230 kg = (230/46) kg - mol = 5 kg – mol

$Na_2Cr_2O_7$ necesario = (5 × 2)/3 kg - mol = 3.333 kgmol = 873.33 kg

H_2SO_4 necesario = (5 × 8)/3 kg - mol = 13.333 kgmol = 1306.667 kg

3.4. A un reactor se alimenta una mezcla equimolar de las sustancias A, B y C, para producir el producto D mediante la reacción:

$$\mathbf{A + 2\,B + \tfrac{3}{2}\,C \longrightarrow 2\,D + E}$$

Si la conversión en el reactor es del 50 %, calcule el número de moles del producto D que se forman por mol de alimentación al reactor.

SOLUCIÓN

La reacción es:

$$A + 2\,B + \tfrac{3}{2}\,C \longrightarrow 2\,D + E$$

Los coeficientes estequiométricos de los reactivos son:

$$\sigma_A = -1 \qquad \sigma_B = -2 \qquad \sigma_C = -\tfrac{3}{2}$$

Es necesario encontrar el reactivo límite para determinar a cuál de ellos se refiere la conversión.

Para una mol de reactivos, las cantidades de A, B y C será de $\frac{1}{3}$ mol para cada uno:

$$N_A^{entrada} = N_B^{entrada} = N_C^{entrada} = \frac{1}{3}$$

Por tanto:

$$\frac{N_A^{entrada}}{\sigma_A} = \frac{\left(\frac{1}{3}\right)}{1} = \frac{1}{3} \qquad \frac{N_B^{entrada}}{\sigma_B} = \frac{\left(\frac{1}{3}\right)}{3} = \frac{1}{6}$$

$$\frac{N_C^{entrada}}{\sigma_C} = \frac{\left(\frac{1}{3}\right)}{\left(\frac{3}{2}\right)} = \frac{2}{9}$$

La cantidad menor es $1/6$, lo que significa que el compuesto B es el reactivo límite y la conversión de 50 % estará referida a él.

La velocidad de reacción es:

$$r = \frac{N_S^{entrada} \; X_S}{-\sigma_S} = \frac{N_B^{entrada} \; X}{-\sigma_B} = \frac{\frac{1}{3} \times 0.5}{2} = \frac{1}{12} \text{ mol}$$

Las moles del producto serán:

$$N_D^{salida} = \sigma_D \quad r = 2 \times \frac{1}{12} \text{ mol} = \frac{1}{6} \text{ mol}$$

3.5. Se efectúa una reacción cuya ecuación estequiométrica es:

A + 3 B ⟶ 2 D

Con 20 % de conversión de A.

La corriente de alimentación al reactor contiene 25 % de A y 75 % de B (porcentaje en masa) y tiene un flujo de 1000 kg/h.

Si la masa molecular de A es 28 y el de B es 2:

a. Calcule la masa molecular de D.

b. Calcule la composición en base masa de la corriente de salida.

SOLUCIÓN

a. Calcule la masa molecular de D.

La reacción es:

$$A \quad + \quad 3\ B \quad \longrightarrow \quad 2\ D \qquad y \qquad X_A = 0.2$$

Los flujos de entrada son:

$$F^{ent.}_{\ A} = 1000 \times 0.25 = 250 \text{ kg} \qquad N^{ent.}_{\ A} = (125/14) \text{ kgmol}$$

$$F^{ent.}_{\ B} = 750 \text{ kg} \qquad N^{ent.}_{\ B} = (750/2) \text{ kg - mol}$$

Los coeficientes estequiométricos son:

$$\sigma_A = -1 \qquad \sigma_B = -3 \qquad \sigma_C = 2$$

La velocidad de reacción es:

$$r = \frac{X_A \quad N_A^{entrada}}{-\sigma_A} = \frac{\frac{1}{5} \times \frac{125}{14}}{1} = \frac{125}{70}$$

Los flujos de salida son:

$$N_A^{salida} = N_A^{entrada} + \sigma_A \ r = \left(\frac{125}{14} - \frac{125}{70} \right) = \frac{500}{70}$$

$$N_B^{salida} = N_B^{entrada} + \sigma_B \ r = \left(\frac{750}{2} - \frac{3 \times 125}{70} \right) = \frac{25875}{70}$$

$$N_D^{salida} = N_D^{entrada} + \sigma_D \ r = \left(0 + \frac{2 \times 125}{70} \right) = \frac{250}{70}$$

Como la masa se conserva, $F^{sal.} = 1000$, o sea que:

$$F_A^{salida} \quad + \quad F_B^{salida} \quad + \quad F_D^{salida} \quad = 1000$$

y en función del número de moles y la masa molecular:

$$MM_A\ N_A^{salida} \quad + \quad MM_B\ N_B^{salida} \quad + \quad MM_D\ N_D^{salida} = 1000$$

donde MM es la masa molecular.

Reemplazando:

$$\frac{500}{70} \times 28 \quad + \quad \frac{25875}{70} \times 2 \quad + \quad \frac{250}{70} \times MM_D = 1000$$

Despejando,

$$\mathbf{MM_D = 17}$$

b. Calcule la composición en base masa de la corriente de salida.

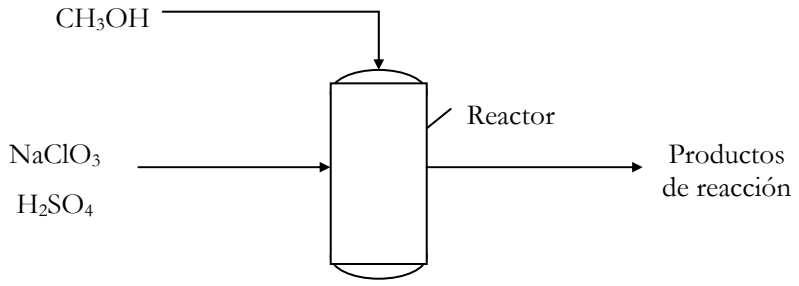
Las masas de A, B y D son respectivamente 200, 739.3 y 60.7 kg, por tanto,

$$\mathbf{w_A = 0.2} \qquad \mathbf{w_B = 0.7393} \qquad \mathbf{w_D = 0.0607}$$

3.6. El gas de bióxido de cloro se utiliza en la industria papelera para blanquear la pulpa producida en un molino Kraft. El gas se produce haciendo reaccionar clorato de sodio, ácido sulfúrico y metanol, en reactores recubiertos de plomo:

$$\mathbf{6\ NaClO_3 + 6\ H_2SO_4 + CH_3OH \longrightarrow 6\ ClO_2 + 6\ NaHSO_4 + CO_2 + 5\ H_2O}$$

Suponga que se utilizan 14 moles de una mezcla equimolar de $NaClO_3$ y H_2SO_4 por mol de CH_3OH como se muestra en la figura:



a. Determine el reactivo limitante.

b. Calcule los flujos de reactivos necesarios para producir 10 toneladas métricas por hora de ClO_2, suponiendo que se obtiene una conversión del 90 %.

SOLUCIÓN

La reacción es:

$$6\ NaClO_3 + 6\ H_2SO_4 + CH_3OH \longrightarrow 6\ ClO_2 + 6\ NaHSO_4 + CO_2 + 5\ H_2O$$

a. Determine el reactivo limitante.

Las moles de reactivos son:

$$N_{CH_3OH}^{entrada} = 1 \qquad N_{NaClO_3}^{entrada} = 7 \qquad N_{H_2SO_4}^{entrada} = 7$$

Los coeficientes estequiométricos son:

$$\sigma_{CH_3OH} = -1 \qquad \sigma_{NaClO_3} = -6 \qquad \sigma_{H_2SO_4} = -6$$

Las relaciones entre las moles de alimentación y los coeficientes estequiométricos son:

$$\frac{N_{CH_3OH}^{entrada}}{\sigma_{CH_3OH}} = 1 \qquad \frac{N_{NaClO_3}^{entrada}}{\sigma_{NaClO_3}} = \frac{7}{6} \qquad \frac{N_{H_2SO_4}^{entrada}}{\sigma_{H_2SO_4}} = \frac{7}{6}$$

El reactivo límite es el metanol, ya que tiene la menor de las tres relaciones anteriores.

b. Calcule los flujos de reactivos necesarios para producir 10 toneladas métricas por hora de ClO_2, suponiendo que se obtiene una conversión del 90 %.

La conversión es:

$$X_{CH_3OH} = 0.9$$

El flujo de salida de producto es:

$$F_{ClO_2}^{sal} = 10000 \text{ kg/h}$$

El coeficiente estequiométrico del ClO_2 es: $\sigma_{CO_2} = 6$

Por tanto,

$$N^{sal}_{ClO_2} = N^{ent}_{ClO_2} + \sigma_{ClO_2}\, r$$

luego la velocidad de reacción es:

$$r = \frac{148.258}{6}\frac{kgmol}{h} = 24.71\frac{kgmol}{h}$$

Ahora, con base en la conversión:

$$24.710\frac{kgmol}{h} = \frac{N^{entrada}_{CH_3OH}}{-\sigma_{CH_3OH}} = \frac{N^{entrada}_{CH_3OH} \times 0.9}{6}$$

Despejando,

$$N^{entrada}_{CH_3OH} = 27.456\frac{kgmol}{h}$$

y con las condiciones del problema:

$$N^{entrada}_{NaClO_3} = N^{entrada}_{H_2SO_4} = 7\, N^{entrada}_{CH_3OH} = 7 \times 27.456\frac{kgmol}{h} = 192.189\frac{kgmol}{h}$$

Multiplicando por las masas moleculares:

$$F^{entrada}_{NaClO_3} = 106.45\frac{kg}{kgmol} \times 192.189\frac{kgmol}{h} = 20458.52\frac{kg}{h}$$

$$F^{entrada}_{H_2SO_4} = 98\frac{kg}{kgmol} \times 192.189\frac{kgmol}{h} = 18834.52\frac{kg}{h}$$

$$F^{entrada}_{CH_3OH} = 32\frac{kg}{kgmol} \times 27.456\frac{kgmol}{h} = 878.59\frac{kg}{h}$$

3.7. En la industria del ácido sulfúrico, el nombre óleum se utiliza para un ácido con una pureza del 100 % que contiene SO_3 libre sin reaccionar disuelto en el ácido. Por ejemplo, un óleum de 20 % contiene 20 lb de SO_3 en 80 lb de ácido al 100 %, por cada 100 lb de mezcla. También es posible designar al óleum como un porcentaje de ácido sulfúrico superior al 100 %. Se calcula como las libras de ácido al 100 % que se obtendrían mediante la adición de suficiente agua a 100 lb de óleum para disolver todo el SO_3.

Usando estas definiciones, calcule:

a. Las libras de óleum de 25 % que puede producirse con 100 lb de azufre.

b. El porcentaje de ácido sulfúrico que corresponde al óleum de 25 %.

SOLUCIÓN

a. Las libras de óleum de 25 % que puede producirse con 100 lb de azufre.

$$F^{ent}_S = 100 \text{ lb} \qquad N^{ent}_S = (100/32) = 3.125 \text{ lbmol}$$

Tomando como base 100 lb de óleum al 25 %:

$SO_3 = 25$ lb $= 0.3125$ lbmol

$H_2SO_4 = 75$ lb $= 0.76531$ lbmol

S total $= (0.3125 + 0.76531)$ at – lb $= 1.07781$ at - lb

Mediante una simple regla de 3:

En 100 lb de óleum hay 1.07781 at - lb de azufre

en X lb de óleum habrá 3.125 at - lb de azufre

X = 289.94 lb

b. Porcentaje de ácido sulfúrico que corresponde al óleum de 25 %.

Base de cálculo: 100 lb óleum

$SO_3 = 25$ lb $= 0.3125$ lb-mol

$H_2SO_4 = 0.76531$ lbmol

La reacción es:

$$SO_3 + H_2O \longrightarrow H_2SO_4$$

H_2O necesaria = 0.3125 lbmol = 5.625 lb

H_2SO_4 final = (0.3125 + 0.76531) lbmol = 1.07781 lbmol

H_2SO_4 al 100 % = (100 + 5.665) = 98 × 1.07781 = 105.625 lb

o sea que puede decirse que se trata de un óleum al 105.625 %.

De otra manera, la masa final de ácido sulfúrico será:

H_2SO_4 final = Masa inicial + Agua añadida

H_2SO_4 final = (100 + 5.625) lb = 105.625 lb

que conduce, como el producto final está formado por ácido sulfúrico, a la misma respuesta anterior.

3.8. El hipoclorito de sodio se forma de acuerdo con la reacción:

$$\mathbf{2\ NaOH + Cl_2 \longrightarrow NaOCl + NaCl + H_2O}$$

en un reactor continuo.

Para ello se burbujea Cl_2 a través de una solución concentrada (40 % en masa) de NaOH.

Supóngase que la solución de NaOH en H_2O se alimenta a razón de 1000 kg/h y el gas Cl_2, a razón de 10 kgmol/h.

Efectúe las siguientes operaciones:

a. Calcule los grados de libertad, suponiendo que se especifica la conversión.

b. Determine cuál es el reactivo limitante.

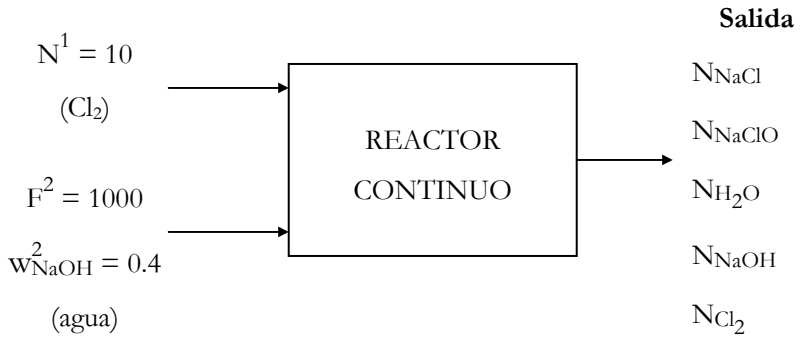
c. Calcule la composición de salida del reactor, suponiendo una conversión de 100 % del reactivo limitante.

d. Calcule la composición de salida del reactor, suponiendo una conversión de 60 % del reactivo limitante.

SOLUCIÓN

El diagrama cuantitativo, con todas las variables del proceso, se muestra en el esquema de la página siguiente:

Diagrama cuantitativo:



a. Calcule los grados de libertad, suponiendo que se especifica la conversión.

La reacción y los coeficientes estequiométricos son:

	2 NaOH	+	Cl_2	⟶	NaOCl	+	NaCl	+	H_2O
σ	– 2		– 1		1		1		1

Relación: Se conoce la conversión.

Tabla de Grados de Libertad: Con base en el diagrama cuantitativo y la relación.

NVI		8 + 1
NBMI	5	
NFC	2	
NCC	1	
NRC	1	– 9
G de L		**0**

b. Determine cuál es el reactivo limitante.

Los flujos molares de los reactivos son:

$$N_{NaOH}^{entrada} = \frac{1000 \times 0.4}{40} \frac{kgmol}{h} = 10 \frac{kgmol}{h} \qquad N_{Cl_2}^{entrada} = 10 \frac{kgmol}{h}$$

Las relaciones entre los flujos de entrada de NaOH y Cl_2 y sus respectivos coeficientes estequiométricos son:

$$\mathbf{R_{NaOH} = \frac{10}{2} = 5} \qquad \mathbf{R_{Cl_2} = \frac{10}{1} = 10}$$

El reactivo límite es el NaOH, al ser menor la relación.

c. Calcule la composición de salida del reactor, suponiendo una conversión de 100 % del reactivo limitante.

Si la conversión es del 100 %, la velocidad de reacción será igual a 5.

Los balances por componente son:

Cl_2: $N^{salida}_{Cl_2} = N^{entrada}_{Cl_2} + \sigma_{Cl_2}\, r = 10 - 5$

$$\mathbf{N^{salida}_{Cl_2} = 5}$$

NaOCl: $N^{salida}_{NaOCl} = N^{entrada}_{NaOCl} + \sigma_{NaOCl}\, r = 0 + 5$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaOCl} = 5}$$

NaCl: $N^{salida}_{NaCl} = N^{entrada}_{NaCl} + \sigma_{NaCl}\, r = 0 + 5$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaCl} = 5}$$

H_2O: $N^{salida}_{H_2O} = N^{entrada}_{H_2O} + \sigma_{H_2O}\, r = (600/18) + 5$

$$\mathbf{N^{salida}_{H2O} = 38.333}$$

La exactitud de los cálculos puede corroborarse al calcular las masas totales a la entrada y a la salida, que como es obvio, deben ser iguales.

Para ello se construye la siguiente tabla:

ENTRADA			**SALIDA**		
	kg - mol	**kg**		**kg - mol**	**kg**
Cl_2	10.0	709	NaOCl	5.000	372.25
NaOH	10.0	400	NaCl	5.000	292.25
H_2O	——	600	H_2O	38.333	690.00
			Cl_2	5.000	354.50
Total		**1709**			**1709.00**

en la cual puede observarse que los resultados son correctos.

La suma de las moles de cada componente será el flujo total:

$$\mathbf{N^{salida} = 53.333 \frac{kgmol}{h}}$$

Y las fracciones molares son:

$$\mathbf{(x_{Cl_2}, x_{NaOCl}, x_{NaCl}, x_{H_2O}) = (0.09375; 0.09375; 0.09375; 0.71875)}$$

d. Calcule la composición de salida del reactor, suponiendo una conversión de 60 % del reactivo limitante.

Con base en la conversión se calcula la velocidad de reacción:

$$\mathbf{r = \frac{X_{NaOH} \quad N^{entrada}_{NaOH}}{-\sigma_{NaOH}} = \frac{10 \times 0.6}{2} = 3.0}$$

A partir de ella, los balances por componente son:

NaOH: $N^{salida}_{NaOH} = N^{entrada}_{NaOH} + \sigma_{NaOH}\, r = 10 - (2 \times 3)$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaOH} = 4}$$

Cl_2: $N^{salida}_{Cl_2} = N^{entrada}_{Cl_2} + \sigma_{Cl_2}\, r = 10 - 3$

$$\mathbf{N^{salida}_{Cl_2} = 7}$$

NaOCl: $N^{salida}_{NaOCl} = N^{entrada}_{NaOCl} + \sigma_{NaOCl}\, r = 0 + 3$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaOCl} = 3}$$

NaCl: $N^{salida}_{NaCl} = N^{entrada}_{NaCl} + \sigma_{NaCl}\, r = 0 + 3$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaCl} = 3}$$

H_2O: $N^{salida}_{H_2O} = N^{entrada}_{H_2O} + \sigma_{H_2O}\, r = (600/18) + 3$

$$\mathbf{N^{salida}_{H2O} = 36.333}$$

Comprobando los resultados con las masas totales a la entrada y a la salida:

ENTRADA			**SALIDA**		
	kg - mol	**kg**		**kg - mol**	**kg**
			NaOH	4.000	160.00
Cl_2	10.0	709	NaOCl	3.000	223.35
NaOH	10.0	400	NaCl	3.000	175.35
H_2O	——	600	H_2O	36.333	654.00
			Cl_2	7.000	496.30
Total		**1709**			**1709.00**

La suma de los flujos de cada componente será el flujo total de salida:

$$\mathbf{N^{salida} = 53.333 \frac{kgmol}{h}}$$

Y las fracciones molares:

$$\mathbf{(x_{NaOH}, x_{Cl_2}, x_{NaOCl}, x_{NaCl}, x_{H_2O}) = (0.075; 0.13125; 0.05625; 0.05625; 0.68125)}$$

3.9. Un proceso antiguo para la producción de ácido clorhídrico requiere de calentar una mezcla de $NaHSO_4$ y NaCl en un horno especial. Cuando se ha efectuado la reacción, el Na_2SO_4 residual permanece como sólido, en tanto que el HCl se recupera en forma gaseosa.

Si la reacción sigue la estequiometría

$$\mathbf{NaHSO_4 + NaCl \longrightarrow Na_2SO_4 + HCl}$$

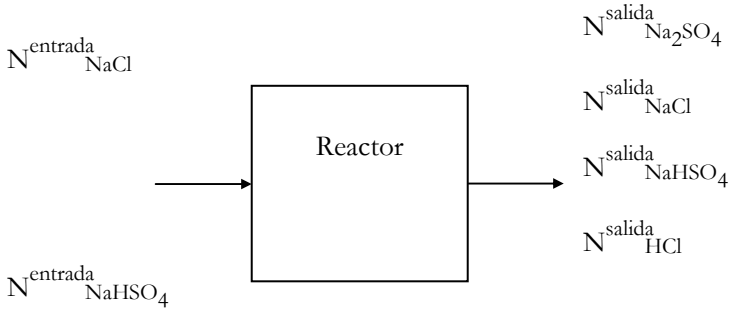
Y se alimentan los reactivos en proporciones estequiométricas, calcule la cantidad y composición de los sólidos residuales. Suponga que la conversión se completa en un 95 % y que se alimenta el NaCl a razón de 5844 lb/día.

SOLUCIÓN

La reacción y los coeficientes estequiométricos son:

	$NaHSO_4$	+	NaCl	$\longrightarrow$	Na_2SO_4	+	HCl
σ	– 1		– 1		1		1

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: Conversión del 95 %.

R_2: $N^1_{NaHSO_4} = N^2_{NaCl}$ (Proporciones estequiométricas, 1:1)

Tabla de Grados de Libertad:

NVI		6 + 1
NBMI	4	
NFC	1	
NCC	0	
NRC	2	– 7
G de L		**0**

El proceso está correctamente especificado y se toma el flujo de NaCl como la base de cálculo.

Se conoce que:

$$F_{NaCl}^{entrada} = 5844 \frac{lb}{día} \qquad y, \qquad N_{NaCl}^{entrada} = \left(\frac{5844}{58.44}\right)\frac{lbmol}{día} = 100\frac{lbmol}{día}$$

La velocidad de reacción puede calcularse utilizando la conversión:

$$\mathbf{r = \frac{0.95 \times 100}{1}\frac{lbmol}{día} = 95\frac{lbmol}{día}}$$

De la relación 2:

$$\mathbf{N_{NaHSO_4}^{entrada} = 100\frac{lbmol}{día}}$$

Los balances por componente son:

Na_2SO_4: $N^{salida}_{Na_2SO_4} = N^{entrada}_{Na_2SO_4} + \sigma_{Na_2SO_4}\ r = 0 + 95$

$$\mathbf{N^{salida}_{Na_2SO_4} = 95}$$

HCl: $N^{salida}_{HCl} = N^{entrada}_{HCl} + \sigma_{HCl}\ r = 0 + 95$

$$\mathbf{N^{salida}_{HCl} = 95}$$

NaCl: $N^{salida}_{NaCl} = N^{entrada}_{NaCl} + \sigma_{NaCl}\ r = 100 - 95$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaCl} = 5}$$

$NaHSO_4$: $N^{salida}_{NaHSO_4} = N^{entrada}_{NaHSO_4} + \sigma_{NaHSO_4}\ r = 100 - 95$

$$\mathbf{N^{salida}_{NaHSO4} = 5}$$

Comprobando los resultados con los flujos másicos de entrada y salida:

ENTRADA			SALIDA		
	lbmol	**Lb**		**lbmol**	**lb**
			Na2SO4	95.0	13490.0
NaCl	100.0	5844	NaCl	5.0	292.2
$NaHSO_4$	100.0	12000	NaHSO4	5.0	600.0
			HCl	95.0	3461.8
Total		**17844**			**17844.0**

Finalmente, se halla la masa total de sólidos y se calcula la fracción máscia de cada uno de los componentes.

Los resultados son:

$$\mathbf{(x_{Na_2SO_4}, x_{NaCl}, x_{NaHSO_4}) = (0.9048; 0.0476; 0.0476)}$$

El HCl sale en la fase gaseosa.

3.10. El superfosfato se produce por la reacción de fosfato de calcio con ácido sulfúrico, de acuerdo con:

$$\mathbf{Ca_3(PO_4)_2 + 2\ H_2SO_4 \longrightarrow CaH_4(PO_4)_2 + 2\ CaSO_4}$$

Se hacen reaccionar 20000 kg/día de fosfato de calcio crudo (que contiene 14 % de impurezas inertes) con 15000 kg/día de H_2SO_4 al 92 %.

Determine la velocidad de producción, suponiendo que la reacción se completa en un 95 %.

¿Cuál es el reactivo limitante?

SOLUCIÓN

La reacción y los coeficientes estequiométricos son:

$$Ca_3(PO_4)_2 \quad + \quad 2\ H_2SO_4 \quad \longrightarrow \quad CaH_4(PO_4)_2 \quad + \quad 2\ CaSO_4$$

$$\sigma - 1 \qquad\qquad -2 \qquad\qquad 1 \qquad\qquad 2$$

Los flujos másicos y molares del fosfato de calcio y el ácido sulfúrico son:

$$\mathbf{F}_{Ca_3(PO_4)_2}^{entrada} = (20000 \times 0.86)\frac{kg}{día} \qquad \textbf{y,} \qquad \mathbf{F}_{H_2SO_4}^{entrada} = (15000 \times 0.92)\frac{kg}{día}$$

$$\mathbf{N}_{Ca_3(PO_4)_2}^{entrada} = \left(\frac{20000 \times 0.86 \frac{kg}{día}}{310 \frac{kg}{kgmol}} \right) = 55.4839 \frac{kgmol}{día}$$

$$\mathbf{N}_{H_2SO_4}^{entrada} = \left(\frac{15000 \times 0.92 \frac{kg}{día}}{92 \frac{kg}{kgmol}} \right) = 140.8163 \frac{kgmol}{día}$$

Las relaciones entre los flujos de entrada y los respectivos coeficientes son:

$$\mathbf{R}_{Ca_3(PO_4)_2} = \frac{55.4839}{1} = 55.4839 \qquad \textbf{y,} \qquad \mathbf{R}_{H_2SO_4} = \frac{140.8163}{2} = 70.4082$$

y como la relación menor corresponde al fosfato, éste es el reactivo límite.

Ahora, con una conversión del 95 % para el reactivo límite, la velocidad de reacción es:

$$\mathbf{r} = \frac{0.95 \times 55.4839}{1} \frac{kgmol}{día} = 52.7097 \frac{kgmol}{día}$$

y,

$$\mathbf{R}_{superfosfato} = 52.7097\ kgmol/día$$

$$\mathbf{R}_{CaSO_4} = 2 \times 52.7097\ kgmol/día = 105.4194\ kgmol/día$$

3.11. En un proceso para la hidratación catalítica de etileno a alcohol etílico, se convierte únicamente una fracción del etileno.

El producto se condensa y retira después de cada paso por el convertidor y los gases no convertidos se recirculan.

Puede suponerse que el condensador elimina todo el alcohol y los gases de recirculación contendrán 6.5 % (molar) de vapor de agua. La conversión de etileno en cada paso por el convertidor es de 4.5 %.

La proporción molar de agua a etileno en la alimentación al convertidor, una vez mezclado el gas recirculado con la alimentación fresca, es de 0.55.

Calcule todas las corrientes del proceso.

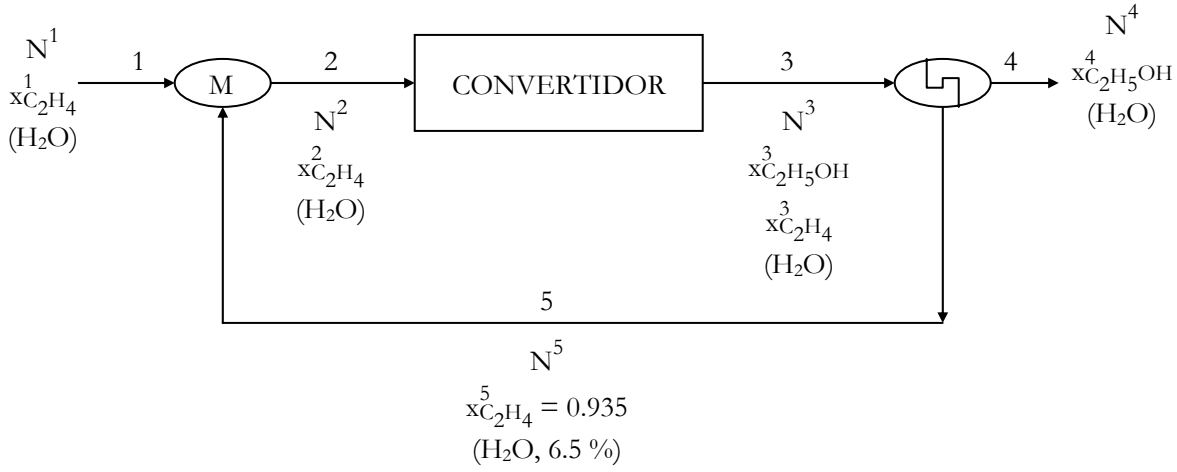
SOLUCIÓN

La reacción y los coeficientes estequiométricos son:

	C_2H_4	+	H_2O	⟶	C_2H_5OH
σ	–1		–1		1

El diagrama cuantitativo del proceso, con las variables de todas las corrientes, se muestra a continuación.

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: $X_{C_2H_4} = 0.045$

R_2: $$\left(\frac{w_S^3}{1-w_S^3}\right) = \left(\frac{w_S^4}{1-w_I^4-w_S^4}\right)$$

Tabla de Grados de Libertad:

	Convertidor	Condensador	Mezclador	Proceso	Global
NVI	5 + 1	7	6	11 + 1	4 + 1
NBMI	3	3	2	8	3
NCC	0	1	1	1	0
NRC R_1	1	–	–	1	–
R_2	1	–	1	1	–
G de L	**1**	**3**	**2**	**1**	**2**
Base	**- 1**			**- 1**	

De la Tabla de Grados de Libertad se observa que el proceso está correctamente especificado y debe tomarse la base de cálculo en el convertidor y realizar ahí los balances.

Balances de materia en el convertidor:

Base de cálculo: Sea $N^2_{C_2H_4} = 100$

De R_2: $N^2_{H_2O} = 55$

La velocidad de reacción es:

$$\mathbf{r} = \left(\frac{\mathbf{X_{C_2H_4}} \quad \mathbf{N^2_{C_2H_4}}}{-\sigma_{\mathbf{C_2H_4}}}\right) = \left(\frac{\mathbf{0.045 \times 100}}{\mathbf{1}}\right) = \mathbf{4.5}$$

Los balances por componente son:

Etileno: $N^3_{C_2H_4} = N^2_{C_2H_4} + \sigma_{C_2H_4}\, r = (100 - 4.5) = 95.5$

$$\mathbf{N^3_{C_2H_4} = 95.5}$$

Alcohol: $N^3_{C_2H_5OH} = N^2_{C_2H5OH} + \sigma_{C_2H_5OH}\ r = 0 + 1 \times 4.5 = 4.5$

$$\mathbf{N^3_{C_2H_5OH} = 4.5}$$

Agua: $N^3_{H2O} = N^2_{H_2O} + \sigma_{H_2O}\ r = (55 - 4.5) = 50.5$

$$\mathbf{N^3_{H_2O} = 50.5}$$

Con las variables conocidas mediante el balance, se procede a actualizar los grados de libertad:

Condensador: G de L A = 3 – 3 Flujos ($N^3_{C_2H_5OH}$, $N^3_{H_2O}$, $N^3_{C_2H_4}$) = 0

Mezclador: G de L A = 2 – 1 Flujo ($N^2_{C_2H_4}$) = 1

No se puede contabilizar $N^2_{H_2O}$ en el mezclador porque este valor se conoce a partir de R_2, y esta relación se contabiliza en esta unidad.

Balances en el Condensador:

Alcohol: $N^4_{C_2H_5OH} = N^3_{C_2H_5OH} = 4.5$

Etileno: $N^5 (1 - 0.065) = 95.5$

$$\mathbf{N^5 = 102.139}$$

De la composición, $N^5_{H_2O} = 102.139 \times 0.065$

$$\mathbf{N^5_{H_2O} = 6.639}$$

Agua: $N^4_{H_2O} = N^3_{H_2O} - N^5_{H_2O} = (50.5 - 6.639)$

$$\mathbf{N^4_{H_2O} = 43.861}$$

De los balances en el condensador se conoce N^5, y con este dato los grados de libertad del mezclador se vuelven cero.

Balances en el Mezclador:

Etileno: $N^{1}_{C_2H_4} + N^{5}_{C_2H_4} = N^{2}_{C_2H_4}$

$$N^{1}_{C_2H_4} = (100 - 95.5)$$

$$\mathbf{N^{1}_{C_2H_4} = 4.5}$$

Agua: $N^{1}_{H_2O} = N^{2}_{H_2O} - N^{5}_{H_2O} = (55 - 6.639)$

$$\mathbf{N^{1}_{H_2O} = 48.361}$$

Los resultados pueden comprobarse hallando los flujos másicos de las corrientes 1 y 4, o sea, las corrientes de entrada y salida en el proceso global:

ENTRADA			**SALIDA**		
	kg-mol	**kg**		**kg-mol**	**kg**
C_2H_4	4.5	126.000	C_2H_5OH	4.5	207.000
H_2O	48.361	870.498	H_2O	43.861	789.498
Total		**996.498**	**Total**		**996.498**

ya que la masa debe conservarse y, como puede verse, deben ser iguales los flujos de entrada y salida.

3.12. Puede producirse ácido acético mediante la reacción:

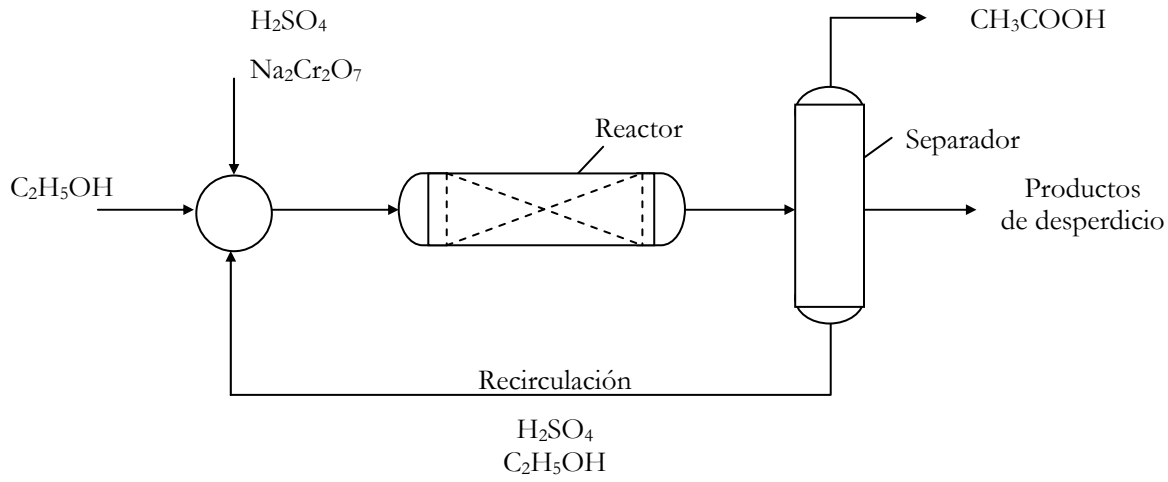
$$\mathbf{3\ C_2H_5OH + 2\ Na_2Cr_2O_7 + 8\ H_2SO_4 \longrightarrow 3\ CH_3COOH + 2\ Cr_2(SO_4)_3 + 2\ Na_2SO_4 + 11\ H_2O}$$

En la corriente de recirculación que se muestra en la figura se obtiene una conversión global de C_2H_5OH del 90 %, con un flujo de recirculación igual al flujo de alimentación de C_2H_5OH fresco.

Los flujos de alimentación de H_2SO_4 y $Na_2Cr_2O_7$ frescos son 20 % y 10 % respectivamente, de exceso sobre las cantidades estequiométricas requeridas para la alimentación fresca de C_2H_5OH.

La corriente de recirculación contiene 94 % de H_2SO_4 y el resto C_2H_5OH.

Calcule el flujo de producto y la conversión de C_2H_5OH en el reactor.

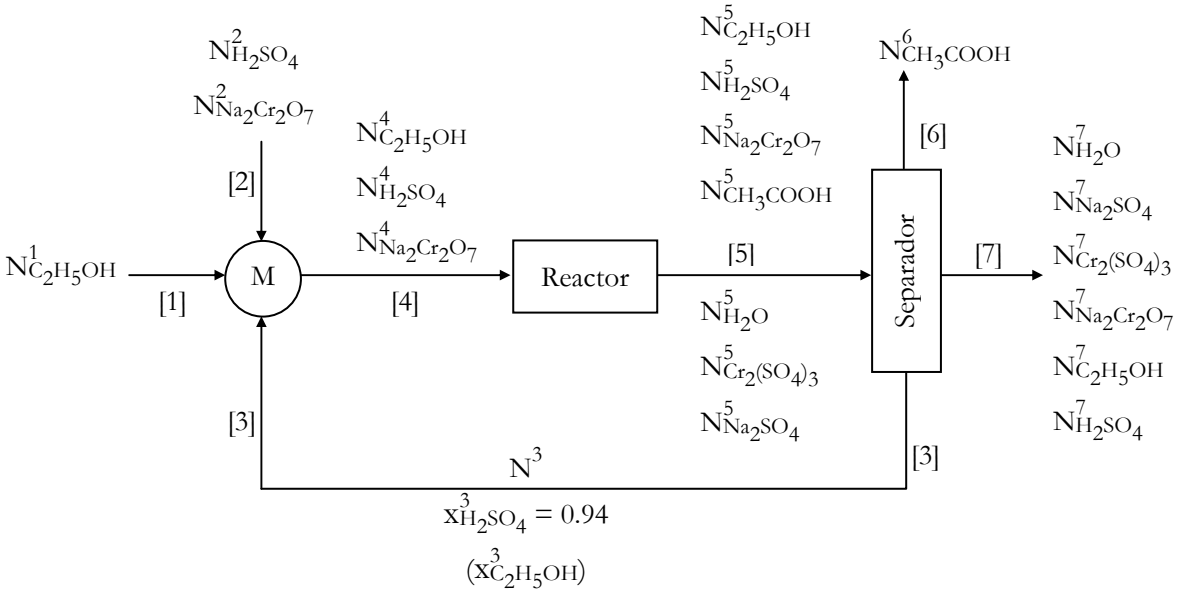


SOLUCIÓN

La reacción es:

$$3\ C_2H_5OH + 2\ Na_2Cr_2O_7 + 8\ H_2SO_4 \longrightarrow 3\ CH_3COOH + 2\ Cr_2(SO_4)_3 + 2\ Na_2SO_4 + 11\ H_2O$$

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: Conversión global del 90 %.

R_2: $N^2_{H_2SO_4}$ = 20 % en exceso del teórico para reaccionar $N^1_{C_2H_5OH}$.

R_3: $N^2_{Na_2Cr_2O_7}$ = 10 % en exceso del teórico para reaccionar $N^1_{C_2H_5OH}$.

R_4: $N^3 = N^1_{C_2H_5OH}$

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	Reactor	Separador	Proceso	Global
NVI	8	10 + 1	16	22 + 1	10 + 1
NBMI	3	7	7	17	7
NFC	0	0	0	0	0
NCC	1	0	1	1	0
NRC R_1	–	–	–	1	1
R_2	1	–	–	1	1
R_3	1	–	–	1	1
R_4	1	–	–	1	–
G de L	**1**	**4**	**8**	**1**	**1**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 7 ($N^1_{C_2H_5OH}$, $N^2_{H_2SO_4}$, $N^2_{Na_2Cr_2O_7}$, N^3, $N^4_{C_2H_5OH}$, $N^4_{H_2SO_4}$, $N^4_{Na_2Cr_2O_7}$)

Ecuaciones = 3 (balances) + 3 (R_2, R_3, R_4)

G de L = 1

Reactor: Incógnitas = 11 ($N^4_{C_2H_5OH}$, $N^4_{H_2SO_4}$, $N^4_{Na_2Cr_2O_7}$, $N^5_{C_2H_5OH}$, $N^5_{H_2SO_4}$, $N^5_{Na_2Cr_2O_7}$, $N^5_{CH_3COOH}$, $N^5_{H_2O}$, $N^5_{Cr_2(SO_4)_3}$, $N^5_{Na_2SO_4}$, r)

Ecuaciones = 7 (balances)

G de L = 4

Separador: Incógnitas = 15 ($N^5_{C_2H_5OH}$, $N^5_{H_2SO_4}$, $N^5_{Na_2Cr_2O_7}$, $N^5_{CH_3COOH}$,

o $N^5_{H_2O}$, $N^5_{Cr_2(SO_4)_3}$, $N^5_{Na_2SO_4}$, $N^7_{H_2O}$, $N^7_{Na_2SO_4}$,

$N^7_{Cr_2(SO_4)_3}$, $N^7_{Na_2Cr_2O_7}$, $N^7_{C_2H_5OH}$, $N^7_{H_2SO_4}$,

N^3, $N^6_{CH_3COOH}$)

Ecuaciones = 7 (balances)

G de L = 8

Global: Incógnitas = 11 ($N^1_{C_2H_5OH}$, $N^2_{H_2SO_4}$, $N^2_{Na_2Cr_2O_7}$, $N^7_{H_2O}$,

$N^7_{Na_2SO_4}$, $N^7_{Cr_2(SO_4)_3}$, $N^7_{Na_2Cr_2O_7}$, $N^7_{C_2H_5OH}$,

$N^7_{H_2SO_4}$, $N^6_{CH_3COOH}$, r)

Ecuaciones = 7 (balances) + 3 (R_1, R_2, R_3)

G de L = 1

Tomando una base de cálculo el proceso queda correctamente especificado y pueden resolverse los balances en el proceso global o en el mezclador.

CÁLCULOS:

Base de cálculo. Sea $N^1 = 1000$

De la reacción:

$$\mathbf{H_2SO_4\ teórico} = \left(\frac{1000 \times 8}{3}\right) = 2666.667$$

De R_2:

$$\mathbf{N^2_{H_2SO_4} = (2666.667 \times 1.2) = 3200}$$

De la reacción,

$$\mathbf{Na_2Cr_2O_7\ teórico} = \left(\frac{1000 \times 2}{3}\right) = 666.667$$

De R_3:

$$\mathbf{N^2_{Na_2Cr_2O_7} = (1.1 \times 666.667) = 733.334}$$

La velocidad de reacción es:

$$\mathbf{r = \left(\frac{0.9 \times 1000}{3} \right) = 300}$$

Balances Globales:

Los balances por componente son:

H_2O: $N^7_{H_2O} = 11\ r = 11 \times 300$

$$\mathbf{N^7_{H_2O} = 3300}$$

Na_2SO_4: $N^7_{Na_2SO_4} = 2\ r = 2 \times 300$

$$\mathbf{N^7_{Na_2SO_4} = 600}$$

$Cr_2(SO_4)_3$: $N^7_{Cr_2(SO_4)_3} = 2\ r = 2 \times 300$

$$\mathbf{N^7_{Cr_2(SO_4)_3} = 600}$$

$Na_2Cr_2O_7$: $N^7_{Na_2Cr_2O_7} = 7333.334 - 2\ r = 733.334 - 600$

$$\mathbf{N^7_{Na_2Cr_2O_7} = 133.334}$$

C_2H_5OH: $N^7_{C_2H_5OH} = 1000 - 3\ r = 1000 - 900$

$$\mathbf{N^7_{C_2H_5OH} = 100}$$

H_2SO_4: $N^7_{H_2SO_4} = 3200 - 8\ r = 3200 - 2400$

$$\mathbf{N^7_{H_2SO_4} = 800}$$

CH_3COOH: $N^6_{CH_3COOH} = 3\,r = 3 \times 300$

$$\mathbf{N^6_{CH_3COOH} = 900}$$

Balances en el Mezclador:

Desde el comienzo tiene cero grados de libertad.

Alcohol: $N^4_{C_2H_5OH} = 1000 + 60$

$$\mathbf{N^4_{C_2H_5OH} = 1060}$$

Ácido sulfúrico: $N^4_{H_2SO_4} = 3200 + 940$

$$\mathbf{N^4_{H_2SO_4} = 4140}$$

Dicromato: $\mathbf{N^4_{Na_2Cr_2O_7} = 733.334}$

Actualizando los grados de libertad se halla que:

Separador: G de L A = 8 – 7 Flujos ($N^6_{CH_3COOH}$ y 6 de N^7) = 1

O sea que tendría un grado de libertad, pero como se conoce la corriente 1 puede utilizarse R_4 y con N^3 conocido, los grados de libertad del separador se hacen cero.

Balances en el Separador:

Acético: $N^5_{CH_3COOH} = 900 = N^6_{CH_3COOH}$

De R_4: $N^3 = 1000$

Agua: $N^5_{H_2O} = 3300 = N^7_{H_2O}$

Sulfato sódico: $N^5_{Na_2SO_4} = 600 = N^7_{Na_2SO_4}$

Sulfato de cromo: $N^5_{Cr_2(SO_4)_3} = 600 = N^7_{Cr_2(SO_4)_3}$

Cromato: $N^5_{Na_2Cr_2O_7} = 133.334 = N^7_{Na_2Cr_2O_7}$

Ácido sulfúrico: $N^5_{H_2SO_4} = N^7_{H_2SO_4} + x^3_{H_2SO_4} \times N^3 = 800 + 940$

$$\mathbf{N^5_{H_2SO_4} = 1740}$$

Etanol: $N^5_{C_2H_5OH} = N^7_{C_2H_5OH} + x^3_{C_2H_5OH} \times N^3 = 100 + 940$

$$\mathbf{N^5_{C_2H_5OH} = 1740}$$

Finalmente,

$$\mathbf{X_{C_2H_5OH} = \left(\frac{N^4_{C_2H_5OH} - N^5_{C_2H_5OH}}{N^4_{C_2H_5OH}} \right) = \left(\frac{1060 - 160}{1060} \right) = 0.8491}$$

Es más sencillo resolver los balances en el mezclador después del separador, porque tiene menos componentes (tal como se hizo).

Pero al actualizar los grados de libertad del reactor sabiendo que:

G de L A = G de L – Corrientes determinadas + Balances utilizados

– Velocidades de reacción

Se obtiene:

G de L A = 4 – 7 (Flujos de la corriente 5)

+ 4 (ya se han agotado los balances de acético, agua,

sulfato de sodio y sulfato de cromo)

– 1 (velocidad de reacción)

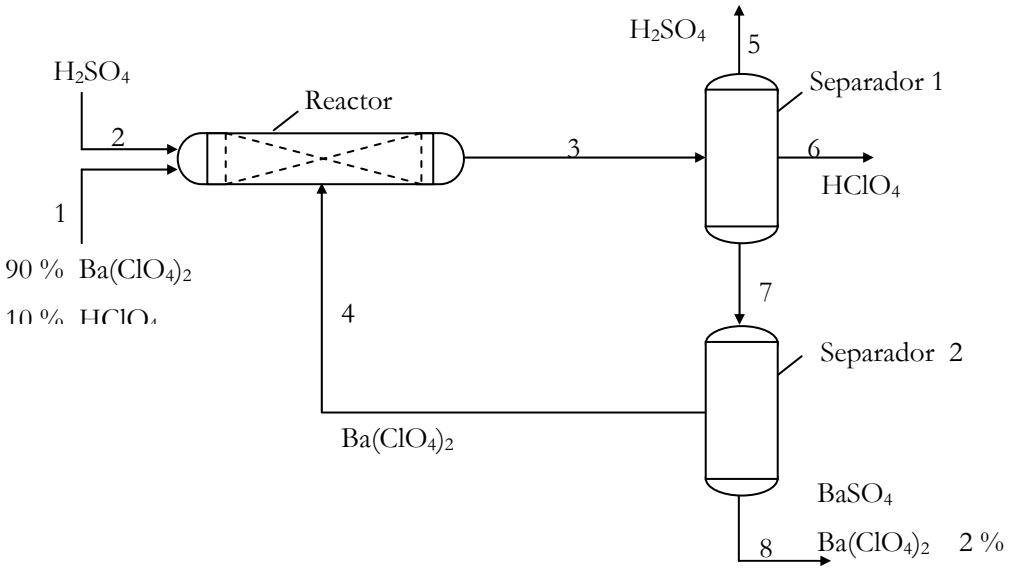
G de L A = 4 – 7 + 4 – 1 = 0

El proceso sólo tiene dos balances para cada uno de los 4 componentes citados y ya se utilizaron al resolver los balances en el proceso global y en el separador. Esto puede analizarse en la tabla de balances que se presenta en la siguiente página.

Tabla de Balances:

	Mezclador	Reactor	Separador	Proceso	Global
$Na_2Cr_2O_7$	1	1	1	3	1
H_2SO_4	1	1	1	3	1
C_2H_5OH	1	1	1	3	1
CH_3COOH	–	1	1	2	1
H_2O	–	1	1	2	1
Na_2SO_4	–	1	1	2	1
$Cr_2(SO_4)_3$	–	1	1	2	1
Total	**3**	**7**	**7**	**17**	**7**

3.13. La figura muestra un posible diagrama de flujo para la producción de ácido perclórico:



La reacción sigue la estequiometría:

$$\mathbf{Ba(ClO_4)_2 + H_2SO_4 \longrightarrow BaSO_4 + 2\ HClO_4}$$

Si el H_2SO_4 alimentado al reactor es un 20 % de exceso sobre la cantidad estequiométrica requerida para la reacción con la alimentación fresca de $Ba(ClO_4)_2$, y se alimentan 1000 lb/h de la corriente 1, calcule todas las variables desconocidas de las corrientes.

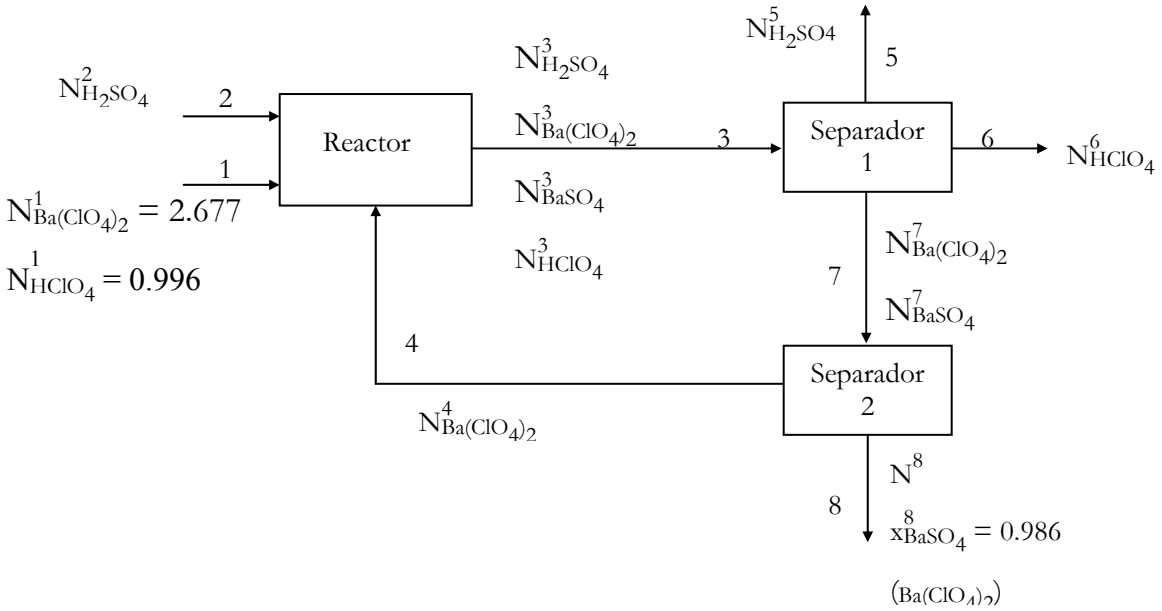
Suponga que todas las composiciones están en fracción masa.

SOLUCIÓN

Cuando hay reacción química es recomendable trabajar con porcentajes molares en vez de porcentajes másicos, y lo mismo puede decirse de los flujos (molares en vez de másicos).

Por eso en el diagrama del proceso se expresa directamente el flujo de la corriente 1 en moles y la composición de la corriente 8 en base molar.

Diagrama cuantitativo:



Los cálculos para estos cambios, partiendo del flujo másico, la composición y la masa molecular, son:

Sea $F^1 = 1000$ lb/h

$$F^1_{Ba(ClO_4)_2} = 900 \text{ lb/h} \qquad \text{y} \qquad F^1_{HClO_4} = 100 \text{ lb/h}$$

$$N^1_{Ba(ClO_4)_2} = \frac{900 \dfrac{\text{lb}}{\text{h}}}{336.24 \dfrac{\text{lb}}{\text{lbmol}}} = 2.677 \frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$$

$$N^1_{HClO_4} = \frac{100 \dfrac{\text{lb}}{\text{h}}}{100.450 \dfrac{\text{lb}}{\text{lbmol}}} = 0.996 \frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$$

Además tomando una base de 100 unidades para la corriente 8 es fácil ver que:

$$x^{8}_{BaSO_4} = \left(\frac{\frac{98}{233.34}}{\frac{98}{233.34} + \frac{2}{336.24}} \right) = 0.986$$

Relación:

R_1: $N^{2}_{H_2SO_4}$ entra en exceso del 20% sobre el teórico para reaccionar con $N^{1}_{Ba(ClO_4)_2}$.

Tabla de Grados de Libertad:

	Reactor	**Separador 1**	**Separador 2**	**Proceso**	**Global**
NVI	8 + 1	8	5	14 + 1	7 + 1
NBMI	4	4	2	10	4
NFC	2	0	0	2	2
NCC	0	0	1	1	1
NRC R_1	1	–	–	1	1
G de L	**2**	**4**	**2**	**1**	**0**

Tal como puede verse, el proceso se encuentra sub-especificado, aunque por tener cero grados de libertad pueden resolverse los balances en el proceso Global.

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Reactor: Incógnitas = 7 ($N^{2}_{H_2SO_4}$, $N^{3}_{H_2SO_4}$, $N^{3}_{Ba(ClO_4)_2}$, $N^{3}_{BaSO_4}$, $N^{3}_{HClO_4}$, $N^{4}_{Ba(ClO_4)_2}$, r)

Ecuaciones = 4 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 2

Separador 1: Incógnitas = 8 ($N^{3}_{H_2SO_4}$, $N^{3}_{Ba(ClO_4)_2}$, $N^{3}_{BaSO_4}$, $N^{3}_{HClO_4}$, $N^{5}_{H_2SO_4}$, $N^{6}_{HClO_4}$, $N^{7}_{Ba(ClO_4)_2}$, $N^{7}_{BaSO_4}$)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 4

Separador 2: Incógnitas = 4 ($N^{4}_{Ba(ClO_4)_2}$, $N^{7}_{Ba(ClO_4)_2}$, $N^{7}_{BaSO_4}$, N^{8})

Ecuaciones = 2 (balances)

G de L = 2

Global: Incógnitas = 5 ($N^{2}_{H_2SO_4}$, $N^{5}_{H_2SO_4}$, $N^{6}_{HClO_4}$, N^{8}, r)

Ecuaciones = 4 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 0

Tabla de Balances:

	Reactor	Separador 1	Separador 2	Proceso	Global
H_2SO_4	1	1	–	2	1
$HClO_4$	1	1	–	2	1
$BaSO_4$	1	1	1	3	1
$Ba(ClO_4)_2$	1	1	1	3	1
Total	**4**	**4**	**2**	**10**	**4**

Estrategia de Solución:

1. Se resuelven Globales y se conoce: r, $N^{2}_{H_2SO_4}$, $N^{5}_{H_2SO_4}$, $N^{6}_{HClO_4}$, N^{8} y se agota R_1.

2. Actualizando Grados de Libertad:
   Reactor: G de L A = 2 – 1 ($N^{2}_{H_2SO_4}$) – 1 (r) + 1 (R_1 agotado) = 1
   Separador 1: G de L A = 4 – 2 ($N^{5}_{H_2SO_4}$, $N^{6}_{HClO_4}$) = 2
   Separador 2: G de L A = 2 – 1 (N^{8}) = 1

3. Se resuelve el Separador 2, arrastrando una variable y se conocen: $N^{7}_{Ba(ClO_4)_2}$, $N^{7}_{BaSO_4}$, $N^{4}_{Ba(ClO_4)_2}$, en función de una variable.

4. Actualizando Grados de Libertad:
   Reactor: G de L A = $1 - 1\ (N^{4}_{Ba(ClO_4)_2})$ + 1 (f var) = 1
   Separador 1: G de L A = $2 - 2\ (N^{7}_{Ba(ClO_4)_2}, N^{7}_{BaSO_4})$ + 1 (f var) = 1

5. Se resuelve el Separador 1.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

De R_1: $N^{2}_{H_2SO_4}$ usado = 2.677 × 1.2 lbmol

$$\mathbf{N^{2}_{H_2SO_4}\ usado = 3.212\ lbmol}$$

H_2SO_4: $N^{5}_{H_2SO_4} = N^{2}_{H_2SO_4} - r$ (1)

$Ba(ClO_4)_2$: $(1 - 0.986) \times N^{8} = 2.677 - r$ (2)

$HClO_4$: $N^{6}_{HClO_4} = 0.996 + 2 \times r$ (3)

$BaSO_4$: $0.986 \times N^{8} = r$ (4)

Resolviendo el sistema de 4 ecuaciones con 4 incógnitas:

$\mathbf{N^{8} = 2.677}$ $\mathbf{r = 2.640}$

$\mathbf{N^{5}_{H_2SO_4} = 0.572}$ $\mathbf{N^{6}_{HClO_4} = 6.276}$

Balances en el Separador 2:

$BaSO_4$: $0.986 \times 2.677 = N^{7}_{BaSO_4}$

$$\mathbf{N^{7}_{BaSO_4} = 2.640}$$

$Ba(ClO_4)_2$: $(1 - 0.986) \times 2.677 + N^4_{Ba(ClO_4)_2} = N^7_{Ba(ClO_4)_2}$

$$\mathbf{N^7_{Ba(ClO_4)_2} = 0.0375 + N^4_{Ba(ClO_4)_2}}$$

Balances en el Separador 1:

H_2SO_4: $N^5_{H_2SO_4} = N^3_{H_2SO_4}$

$$\mathbf{N^3_{H_2SO_4} = 0.572}$$

$BaSO_4$: $N^7_{BaSO_4} = N^3_{BaSO_4}$

$$\mathbf{N^3_{BaSO_4} = 2.640}$$

$HClO_4$: $N^6_{HClO_4} = N^3_{HClO_4}$

$$\mathbf{N^3_{HClO_4} = 6.276}$$

$Ba(ClO_4)_2$: $N^7_{Ba(ClO_4)_2} = N^3_{Ba(ClO_4)_2}$

$$\mathbf{N^3_{Ba(ClO_4)_2} = 0.0375 + N^4_{Ba(ClO_4)_2}}$$

Comprobando en el Reactor:

H_2SO_4: $N^3_{H_2SO_4} = 3.212 - 2.640$

$$0.572 = 0.572$$

$Ba(ClO_4)_2$: $N^3_{Ba(ClO_4)_2} = 2.677 + N^4_{Ba(ClO_4)_2} - r$

$$0.0375 + N^4_{Ba(ClO_4)_2} = 2.677 + N^4_{Ba(ClO_4)_2} - 2.640$$

$$0.0375 = 0.037$$

$HClO_4$: $N^3_{HClO_4} = 0.996 + 2 \times 2.640$

$6.276 = 6.276$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Globales:

De R_1: $N^2_{H_2SO_4}$ usado $= 2.677 \times 1.2$ lbmol (1)

H_2SO_4: $N^5_{H_2SO_4} = N^2_{H_2SO_4} - r$ (2)

$Ba(ClO_4)_2$: $(1 - 0.986) \times N^8 = 2.677 - r$ (3)

$HClO_4$: $N^6_{HClO_4} = 0.996 + 2 \times r$ (4)

$BaSO_4$: $0.986 \times N^8 = r$ (5)

Separador 2:

$BaSO_4$: $0.986 \times N^8 = N^7_{BaSO_4}$ (6)

$Ba(ClO_4)_2$: $(1 - 0.986) \times N^8 + N^4_{Ba(ClO_4)_2} = N^7_{Ba(ClO_4)_2}$ (7)

Separador 1:

H_2SO_4: $N^5_{H_2SO_4} = N^3_{H_2SO_4}$ (8)

$BaSO_4$: $N^7_{BaSO_4} = N^3_{BaSO_4}$ (9)

$HClO_4$: $N^6_{HClO_4} = N^3_{HClO_4}$ (10)

$Ba(ClO_4)_2$: $N^7_{Ba(ClO_4)_2} = N^3_{Ba(ClO_4)_2}$ (11)

Resolviendo el sistema de 11 ecuaciones, tendremos:

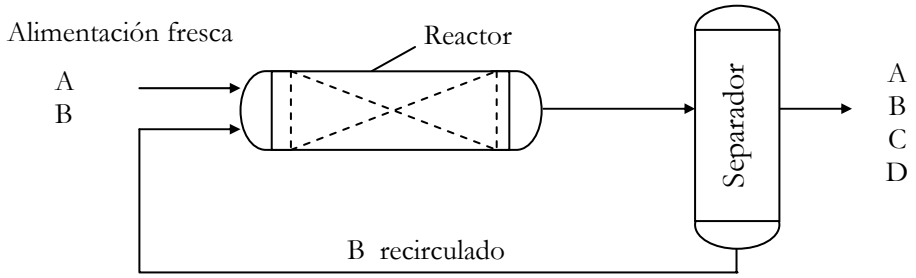
$N^{2}_{H_2SO_4} = 3.212$
$N^{8} = 2.677$
$r = 2.640$
$N^{5}_{H_2SO_4} = 0.572$
$N^{6}_{HClO_4} = 6.276$
$N^{7}_{BaSO_4} = 2.640$
$N^{3}_{H_2SO_4} = 0.572$
$N^{3}_{BaSO_4} = 2.640$
$N^{3}_{HClO_4} = 6.276$

3.14. La reacción:

$$\mathbf{2\ A} \quad + \quad \mathbf{5\ B} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{3\ C} \quad + \quad \mathbf{6\ D}$$

Se efectúa en un reactor con 60% de conversión de B. La mayor parte del B que no reacciona se recupera en un separador y se recircula al reactor, como se muestra en la figura.

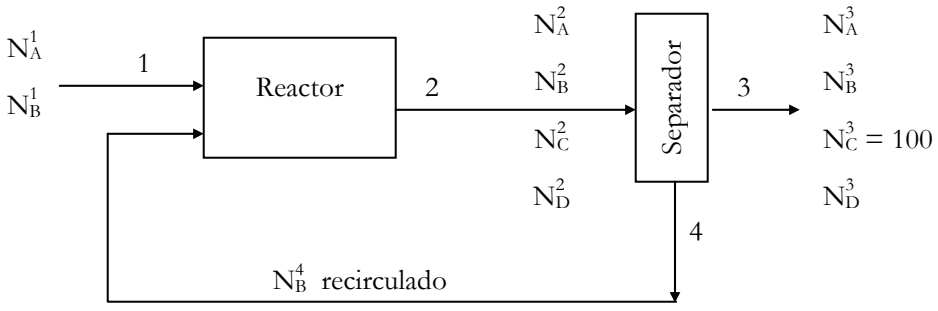
La alimentación fresca al reactor contiene A y B; el A fresco está presente con un exceso de 30 % sobre la cantidad estequiométrica necesaria para reaccionar con el B fresco.



Si la conversión Global de B en el proceso es de 95%, calcule los flujos de producto y recirculación, necesarios para producir 100 moles/h de C.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: Conversión en el reactor del 60% o sale el 40 %.

R_2: Conversión global del 95% o sale el 5 %.

R_3: N_A^1 se alimenta en un 30% en exceso del teórico para reaccionar con $N_{B.}^1$

Tabla de Grados de Libertad:

		Reactor	**Separador**	**Proceso**	**Global**
NVI		7 + 1	9	11 + 1	6 + 1
NBMI		4	4	8	4
NFC		0	1	1	1
NCC		0	0	0	0
NRC	R_1	1	–	1	–
	R_2	–	–	1	1
	R_3	1	–	1	1
G de L		**2**	**4**	**0**	**0**

El proceso está especificado correctamente.

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Reactor: Incógnitas = 8 (N_A^1, N_B^1, N_A^2, N_B^2, N_C^2, N_D^2, N_B^4, r)

Ecuaciones = 4 (balances) + 2 (R_1, R_3)

G de L = 2

Separador: Incógnitas = 8 (N_A^2, N_B^2, N_C^2, N_D^2, N_A^3, N_B^3, N_D^3, N_B^4)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 4

Global: Incógnitas = 6 (N_A^1, N_B^1, N_A^3, N_B^3, N_D^3, r)

Ecuaciones = 4 (balances) + 2 (R_2, R_3)

G de L = 0

Estrategia de Solución:

1. Se resuelven Globales y se conoce: r, N_A^1, N_B^1, N_A^3, N_B^3, N_D^3 se agotan R_2, R_3.
2. Actualizando Grados de Libertad:
   Reactor: G de L A = 2 – 2 (N_A^1, N_B^1) – 1 (r) + 1 (R_3 agotado) = 0
   Separador: G de L A = 4 – 3 (N_A^3, N_B^3, N_D^3) = 1
3. Se resuelve el Reactor y se conoce: N_A^2, N_B^2, N_C^2, N_D^2, N_B^4 y se agota R_1.
4. Se comprueba en el Separador.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

Balance de C: $N_C^3 = 3 \times r = 100$

$$\mathbf{r = 100/3}$$

Balance de D: $N_D^3 = 6 \times r$

$$\mathbf{N_D^3 = 200}$$

Balance de A: $N_A^3 = N_A^1 - 2 \times r$ (1)

Balance de B: $N_B^3 = N_B^1 - 5 \times r$ (2)

De R_2: $N_B^3 = 0.05 \times N_B^1$ (3)

De R_3: $$\text{A teórico} = \left(\frac{N_B^{\text{entrada}} \times \sigma_A}{\sigma_B} \right) = \left(\frac{N_B^1 \times 2}{5} \right)$$

$$N_A^1 = \left(\frac{N_B^1 \times 2}{5} \right) \times 1.3 \quad (4)$$

Resolviendo el sistema de 4 ecuaciones con 4 incógnitas:

$$\mathbf{N_A^1 = 91.228} \qquad \mathbf{N_B^1 = 175.439}$$

$$\mathbf{N_A^3 = 24.561} \qquad \mathbf{N_B^3 = 8.772}$$

Balances en el Reactor:

Balance de A: $N_A^2 = N_A^1 - 2 \times r$

$$\mathbf{N_A^2 = 91.228 - \frac{200}{3} = 24.562}$$

Balance de C: $N_C^2 = 3 \times r = 100$

Balance de D: $N_D^2 = 6 \times r = 200$

Balance de B: $N_B^2 = N_B^1 + N_B^4 - 5 \times r$

$$\mathbf{N_B^2 = 175.439 + N_B^4 - \frac{500}{3}} \qquad (1)$$

De R_1: $N_B^2 = 0.4\,(N_B^1 + N_B^4)$

$$\mathbf{N_B^2 = 0.4\,(175.439 + N_B^4)} \qquad (2)$$

Resolviendo el sistema de dos ecuaciones y dos incógnitas:

$$\mathbf{N_B^2 = 111.112} \qquad \mathbf{N_B^4 = 102.340}$$

Comprobando en el balance de B en el separador:

$$N_B^2 = N_B^3 + N_B^4$$

$$111.112 = 8.772 + 102.340$$

$$111.112 = 111.112$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Globales:

Balance de C: $3 \times r = 100$ (1)

Balance de D: $N_D^3 = 6 \times r$ (2)

Balance de A: $N_A^3 = N_A^1 - 2 \times r$ (3)

Balance de B: $N_B^3 = N_B^1 - 5 \times r$ (4)

De R_2: $N_B^3 = 0.05 \times N_B^1$ (5)

De R_3: $N_A^1 = \left(\frac{N_B^1 \times 2}{5} \right) \times 1.3$ (6)

Reactor:

Balance de A: $N_A^2 = N_A^1 - 2 \times r$ (7)

Balance de C: $N_C^2 = 3 \times r = 100$ (8)

Balance de D: $N_D^2 = 6 \times r = 200$ (9)

Balance de B: $N_B^2 = N_B^1 + N_B^4 - 5 \times r$ (10)

De R_1: $N_B^2 = 0.4 (N_B^1 + N_B^4)$ (11)

Resolviendo el sistema de 11 ecuaciones y 11 incógnitas con el programa **Solvesys** de la calculadora Hewlett Packard, HP – 48 tendremos:

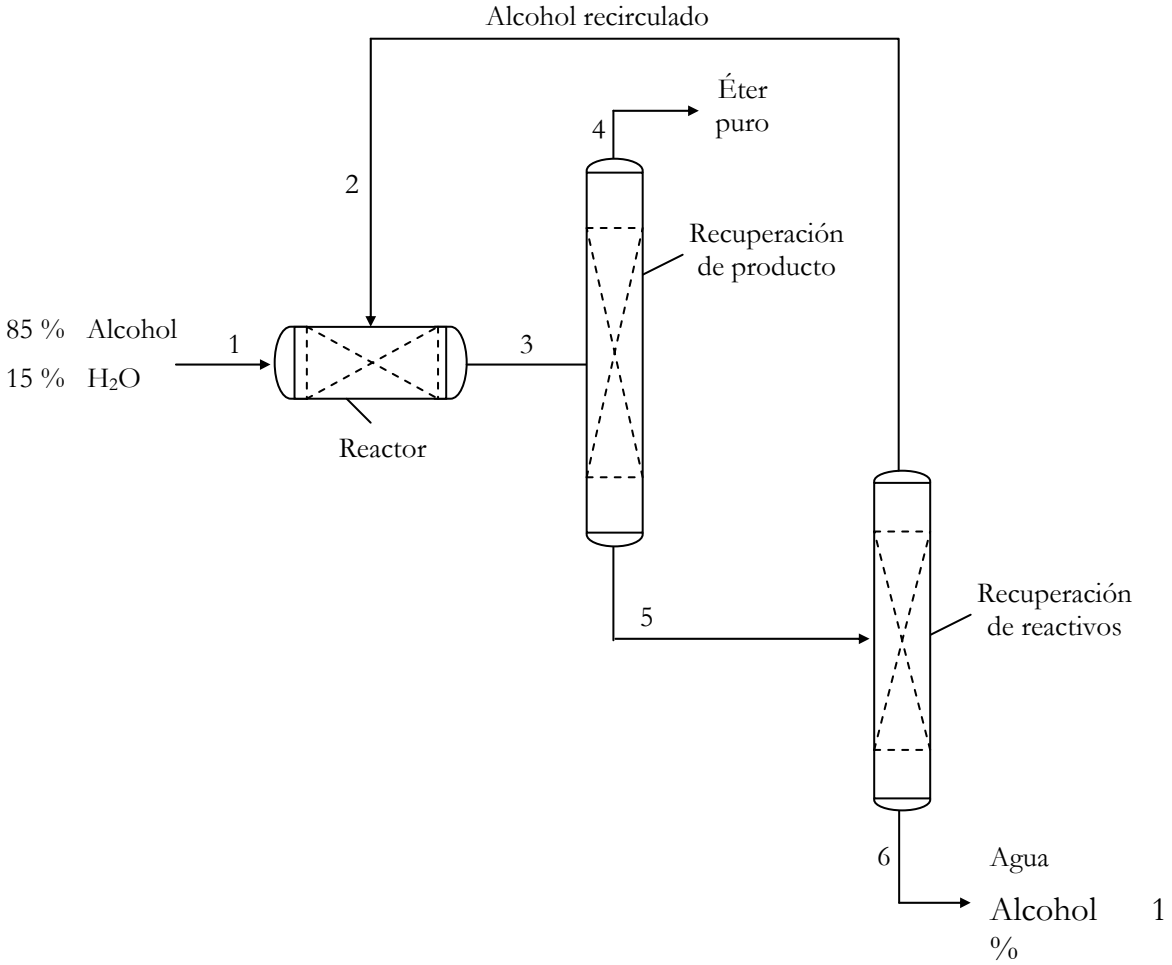
$N_A^1 = 91.228$
$N_B^1 = 175.439$
$N_A^3 = 24.561$
$N_B^3 = 8.772$
$N_B^2 = 111.112$
$N_B^4 = 102.340$

$r = 100/3$
$N_D^3 = 200$
$N_A^2 = 24.562$
$N_B^2 = 111.112$
$N_B^4 = 102.340$

3.15. El solvente éter etílico se fabrica industrialmente mediante la deshidratación del alcohol etílico, usando ácido sulfúrico como catalizador, mediante la siguiente reacción:

$$2\ C_2H_5OH \longrightarrow (C_2H_5)_2O + H_2O$$

Suponiendo que la recirculación es la mitad de la alimentación al proceso; que el flujo de alimentación es de 1000 kg/h de solución de alcohol (que contiene 85% en masa de alcohol); y que la solución de alcohol recirculada tiene la misma composición que la alimentación.



Calcule: **La velocidad de producción de éter.**

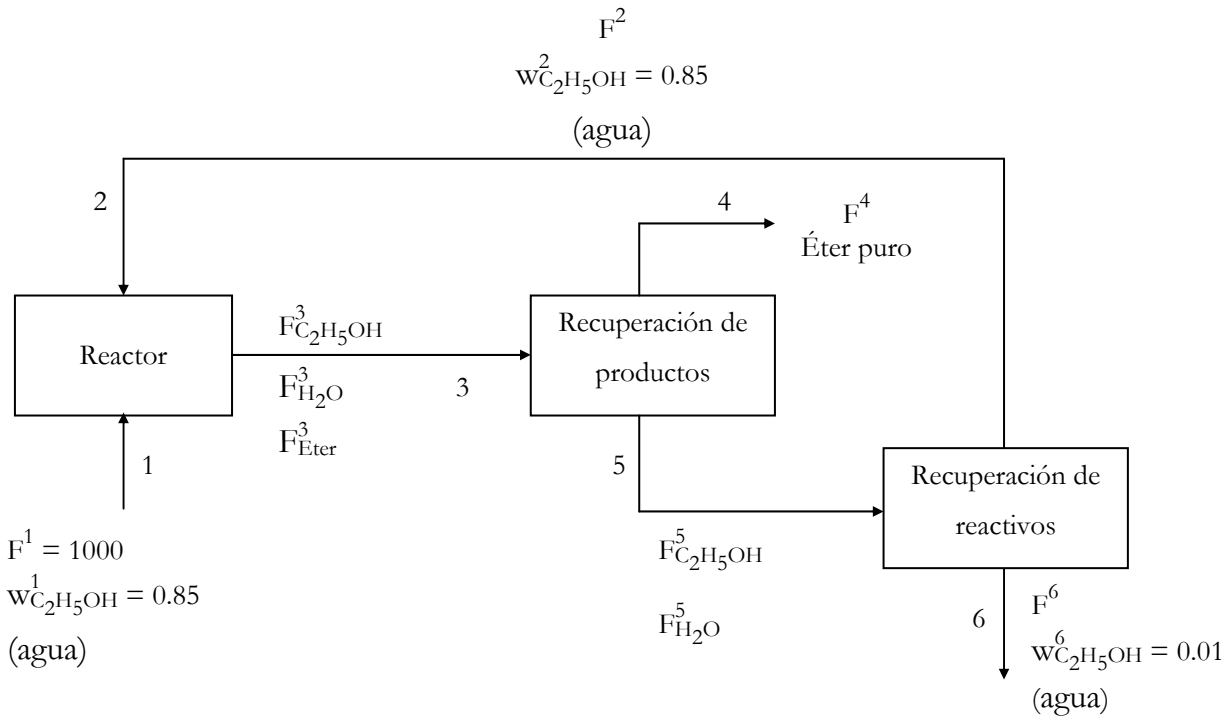
Las pérdidas de alcohol en la corriente 6.

La conversión en el reactor.

La conversión en el proceso.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Relación: R_1: $F^1 = 2\ F^2$

Tabla de Grados de Libertad:

	Reactor	Recuperación de productos	Recuperación de reactivos	Proceso	Global
NVI	7 + 1	6	6	12 + 1	5 + 1
NBMI	3	3	2	8	3
NFC	1	0	0	1	1
NCC	2	0	2	3	2
NRC R_1	1	0	0	1	0
G de L	**1**	**3**	**2**	**0**	**0**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Reactor: Incógnitas = 5 (F^2, $F^3_{C_2H_5OH}$, $F^3_{H_2O}$, F^3_{Eter}, r)

Ecuaciones = 3 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 1

Recuperación de productos:

Incógnitas = 6 ($F^3_{C_2H_5OH}$, $F^3_{H_2O}$, F^3_{Eter}, F^4, $F^5_{C_2H_5OH}$, $F^5_{H_2O}$)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 3

Recuperación de reactivos:

Incógnitas = 4 (F^2, $F^5_{C_2H_5OH}$, $F^5_{H_2O}$, F^6)

Ecuaciones = 2 (balances)

G de L = 2

Global: Incógnitas = 3 (F^4, F^6, r)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 0

Tabla de Balances:

	Reactor	**Recuperación de productos**	**Recuperación de reactivos**	**Proceso**	**Global**
Alcohol	1	1	1	3	1
Agua	1	1	1	3	1
Éter	1	1	–	2	1
Total	**3**	**3**	**2**	**8**	**3**

Estrategia de Solución:

1. Se resuelven los balances Globales y se conoce r, F^4, F^6.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Reactor: G de L A = 1 – 1 (r) = 0
   Recuperación de productos: G de L A = 3 – 1 (F^4) = 2
   Recuperación de reactivos: G de L A = 3 – 1 (F^6) = 2

3. Se resuelve el Reactor y se conoce: F^2, $F^3_{C_2H_5OH}$, $F^3_{H_2O}$, F^3_{Eter} y se agota el balance de éter.

4. Actualizando grados de Libertad:
   Recuperación de productos: G de L A = 2 – 3 ($F^3_{C_2H_5OH}$, $F^3_{H_2O}$, F^3_{Eter})
   + 1 (balance agotado: Éter) = 0
   Recuperación de reactivos: G de L A = 2 – 1 (F^2) = 2

5. Se resuelve Recuperación de productos y se conoce $F^5_{C_2H_5OH}$, $F^5_{H_2O}$ y se agotan balances de alcohol y agua.

6. Se comprueban los balances en la unidad dependiente: Recuperación de Productos.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

Base de cálculo: $\mathbf{F^1 = 1000\ kg/h}$

Alcohol: $0.01\ F^6 = 0.85 \times 1000 - 2 \times 46\ r$

$$0.01\ F^6 = 850 - 92\ r \qquad (1)$$

Agua: $$0.99\ F^6 = 150 + 18\ r \qquad (2)$$

De las ecuaciones (1) y (2):

$$\mathbf{F^6 = 318.8692} \qquad \mathbf{r = 9.2045}$$

Éter: $F^4 = 74\ r = 74 \times 9.2045 = 681.1308$

Balances en el Reactor:

De la relación R_1: $\mathbf{F^2 = 500}$

Alcohol: $F^3_{C_2H_5OH} = (1000 + 500) \times 0.85 - 2 \times 46 \times 9.2045$

$$\mathbf{F^3_{C_2H_5OH} = 428.1887}$$

Agua: $F^3_{H_2O} = (1000 + 500) \times 0.15 + 18 \times 9.2045$

$$\mathbf{F^3_{H_2O} = 390.6805}$$

Éter: $F^3_{Eter} = 74\ r$

$$\mathbf{F^3_{Eter} = 681.1308}$$

Balances en el Recuperador de Productos:

Alcohol: $F^5_{C_2H_5OH} = F^3_{C_2H_5OH}$

$$\mathbf{F^3_{C_2H_5OH} = 428.1887}$$

Agua: $F^5_{H_2O} = F^5_{H_2O}$

$$\mathbf{F^3_{H_2O} = 390.6805}$$

Comprobando en los balances de Recuperación de Reactivos:

$$F^5_{C_2H_5OH} = w^2_{C_2H_5OH} F^2 + w^6_{C_2H_5OH} F^6$$

$$428.1887 = 0.85 \times 500 + 0.01 \times 318.8692$$

$$428.1887 = 425 + 3.1887 = 428.1887$$

Las respuestas que pide el problema son:

a. La velocidad de producción de éter:

$$\mathbf{F^4 = 681.1308\ kg/h}$$

b. Las pérdidas de alcohol en la corriente 6:

$$\mathbf{w^6_{C_2H_5OH}\ F^6 = \quad 0.01 \times 318.8692 \quad = \quad 3.1887\ kg/h}$$

c. La conversión en el reactor:

$$\mathbf{X_{C_2H_5OH}} = \left(\frac{\mathbf{N^{Entrada} - N^{Salida}}}{\mathbf{N^{Entrada}}} \right) = \left(\frac{\left(\mathbf{F^1 + F^2}\right) \times \mathbf{0.85} - \mathbf{F^3_{C_2H_5OH}}}{\left(\mathbf{F^1 + F^2}\right) \times \mathbf{0.85}} \right)$$

$$\mathbf{X_{C_2H_5OH}} = \left(\frac{\mathbf{1500 \times 0.85 - 428.1887}}{\mathbf{1500 \times 0.85}} \right) = \mathbf{0.6642}$$

d. La conversión en el proceso:

$$\mathbf{X_{C_2H_5OH\ proceso}} = \left(\frac{\mathbf{F^1 \times 0.85 - w^6_{C_2H_5OH}\ F^6}}{\mathbf{F^1 \times 0.85}} \right) = \left(\frac{\mathbf{1000 \times 0.85 - 3.1887}}{\mathbf{1000 \times 0.85}} \right)$$

$$\mathbf{X_{C_2H_5OH\ proceso} = 0.9962}$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Utilización del programa **Solvesys** de la calculadora Hewlett Packard HP – 48 GX para la solución de ecuaciones del problema:

Globales:

Base de cálculo: $\mathbf{F^1 = 1000\ kg/h}$

Alcohol: $0.01\ F^6 = 0.85 \times 1000 - 2 \times 46\ r$

$$0.01\ F^6 = 850 - 92\ r \quad (1)$$

Agua: $$0.99\ F^6 = 150 + 18\ r \quad (2)$$

Éter: $$F^4 = 74\ r \quad (3)$$

Reactor:

De R_1: $$1000 = 2\ F^2 \quad (4)$$

Alcohol: $$F^3_{C_2H_5OH} = (1000 + F^2) \times 0.85 - 2 \times 46 \times r \quad (5)$$

Agua: $$F^3_{H_2O} = (1000 + F^2) \times 0.15 + 18 \times r \quad (6)$$

Éter: $$F^3_{Eter} = 74\ r \quad (7)$$

Recuperador de Productos:

Alcohol: $$F^5_{C_2H_5OH} = F^3_{C_2H_5OH} \quad (8)$$

Agua: $$F^5_{H_2O} = F^5_{H_2O} \quad (9)$$

Resolviendo el sistema de 9 ecuaciones con 9 incógnitas, tenemos:

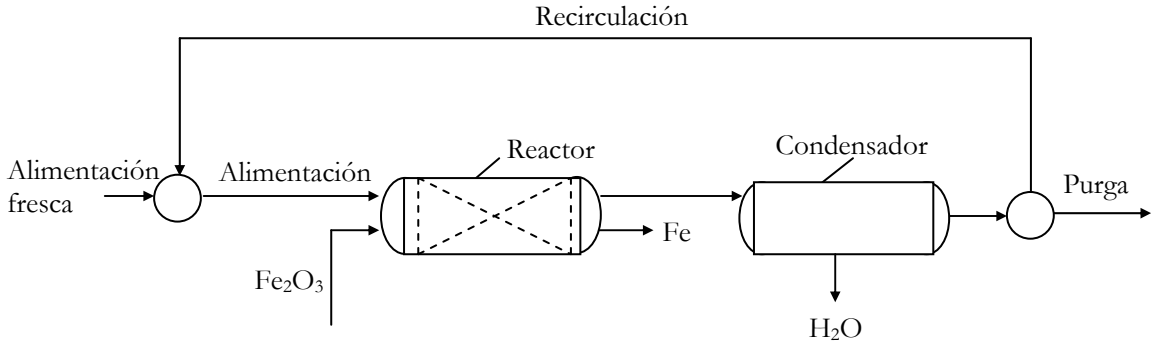
$F^6 = 318.8692$
$r = 9.2045$
$F^4 = 681.1308$
$F^2 = 500$
$F^3_{C_2H_5OH} = 428.1887$
$F^3_{H_2O} = 390.6805$
$F^3_{Eter} = 681.1308$
$F^3_{C_2H_5OH} = 428.1887$
$F^3_{H_2O} = 390.6805$

3.16. Se utiliza hidrógeno para reducir 1 ton/h de Fe_2O_3 hasta hierro metálico, de acuerdo con la reacción:

$$Fe_2O_3 + 3\ H_2 \longrightarrow 2\ Fe + 3\ H_2O$$

El agua se condensa, y se recircula el hidrógeno que no reacciona.

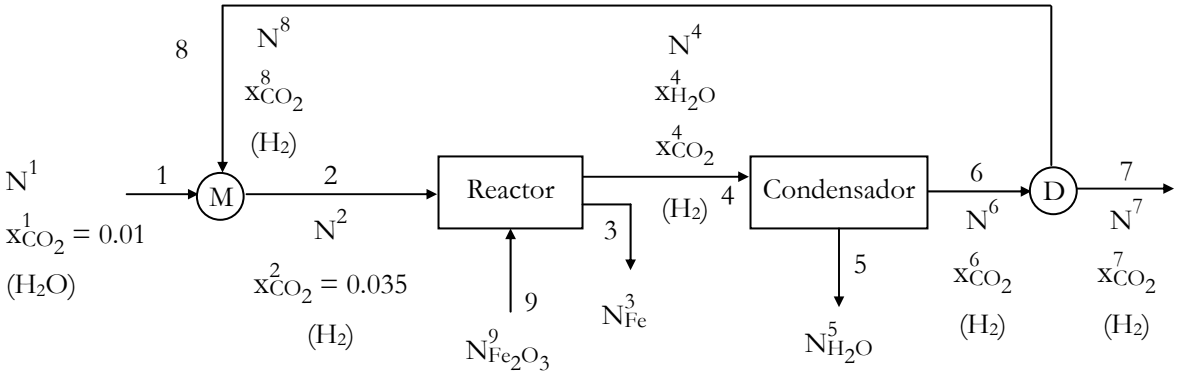
Debido a que el hidrógeno en la alimentación fresca contiene 1 % de CO_2 como impureza, debe purgarse algo del hidrógeno que no reaccionó.



Calcule el flujo y la composición de la corriente de purga que es necesaria para limitar a 3.5% el CO_2 en la alimentación al reactor, si la proporción de recirculación a alimentación fresca es de 5 a 1 en base molar.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: $N^8 = 5\ N^1$

R_2: Restricciones del divisor = (S – 1) (R – 1) = (2 – 1) (2 – 1) = 1

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	Reactor	Condensador	Divisor	Proceso	Global
NVI	6	7 + 1	6	6	16 + 1	7 + 1
NBMI	2	5	3	2	12	5
NFC	0	1	0	0	1	1
NCC	2	1	0	0	2	1
NRC R_1	1	–	–	–	1	–
R_2	–	–	–	1	1	–
G de L	**1**	**1**	**3**	**3**	**0**	**1**
G de Lib	**1**	**2**	**3**	**3**	**1**	**2**
G de L*	**0**	**2**	**3**	**3**	**0**	**1**

Tal como se ve en la fila de grados de libertad, **G de L**, el proceso tiene cero pero no hay ninguna unidad que también los tenga.

Para tener una unidad con cero grados de libertad, se ignora el flujo conocido, N^9. Al hacerlo, se obtiene una nueva fila de grados de libertad para el sistema, marcada como **G de Lib**.

En estas condiciones, tanto el proceso como el mezclador quedan con un grado de libertad y puede tomarse como base de cálculo un flujo en el mezclador, digamos N^1, y los nuevos grados de libertad se muestran en la fila marcada como **G de L***.

De esta manera pueden resolverse los balances en el mezclador y al actualizar la Tabla de Grados de Libertad se encuentra el orden en que se puede resolver el problema.

Al final, mediante una relación de escalado, se encuentra la respuesta con respecto a la base pedida.

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 3 (N^2, N^8, $x^8_{CO_2}$)

Ecuaciones = 2 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 0

Reactor: Incógnitas = 7 (r, N^2, N^3_{Fe}, N^4, $x^4_{H_2O}$, $x^4_{CO_2}$, $N^9_{Fe_2O_3}$)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 2

Condensador: Incógnitas = 6 (N^4, $x^4_{H_2O}$, $x^4_{CO_2}$, $N^5_{H_2O}$, N^6, $x^6_{CO_2}$)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 3

Divisor: Incógnitas = 6 (N^6, $x^6_{CO_2}$, N^7, $x^7_{CO_2}$, N^8, $x^8_{CO_2}$)

Ecuaciones = 2 (balances) + 1 (R_2)

G de L = 3

Global: Incógnitas = 6 (r, N^3_{Fe}, $N^5_{H_2O}$, N^7, $x^7_{CO_2}$, $N^9_{Fe_2O_3}$)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 1

Tabla de Balances:

	Mezclador	**Reactor**	**Condensador**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
H_2	1	1	1	1	4	1
CO_2	1	1	1	1	4	1
Fe	–	1	–	–	1	1
Fe_2O_3	–	1	–	–	1	1
H_2O	–	1	1	–	2	1
Total	**2**	**5**	**3**	**2**	**12**	**5**

Estrategia de Solución:

1. Se toma base de cálculo $N^1 = 1000$, y se resuelve el mezclador hallando N^2, N^8, $x^8_{CO_2}$. Y llevo a ($x^7_{CO_2}$, $x^6_{CO_2}$), y se agota R_1.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Reactor: G de L A = 2 – 1 (N^2) = 1
   Divisor: G de L A = 3 – 1 (N^8) – 1 ($x^8_{CO_2}$) = 1
   Global: G de L A = 1 – 1 ($x^7_{CO_2}$) = 0
   Condensador: G de L A = 3 – 1 ($x^6_{CO_2}$) = 2

3. Al resolver los balances Globales se halla r, $N^{9}_{Fe_2O_3}$, N^{3}_{Fe}, $N^{5}_{H_2O}$, N^{7} y se agotan balances de Fe y Fe_2O_3.

4. Se actualizan grados de libertad:
   Condensador: G de L A = $2 - 1\ (N^{5}_{H_2O}) = 1$
   Divisor: G de L A = $1 - 1\ (N^{7}) = 0$
   Reactor: G de L A = $1 - 2\ (N^{9}_{Fe_2O_3}, N^{3}_{Fe}) - 1\ (r) + 2$ (balances agotados) $= 0$

5. Se resuelve el Reactor y hallo N^{4}, $x^{4}_{H_2O}$, $x^{4}_{CO_2}$ y se agota el balance H_2O.

6. Se reconfirman grados de libertad:
   Divisor: G de L A = $0 - 0 = 0$

7. Se resuelve el Divisor y hallo N^{6}, se agota R_2 y se agotan balances de H_2, CO_2.

8. Se confirman resultados obtenidos en Condensador o unidad dependiente.

CÁLCULOS:

La reacción es:

$$Fe_2O_3 + 3\ H_2 \longrightarrow 2\ Fe + 3\ H_2O$$

Balance en el Mezclador:

Base de cálculo $N^{1} = 1000$

De R_1: $N^{8} = 5 \times 1000 = 5000$

$$\mathbf{N^{8} = 5000}$$

CO_2: $1000 \times 0.01 + x^{8}_{CO_2} \times 5000 = 0.035 \times N^{2}$ (1)

H_2: $1000 \times 0.99 + (1 - x^{8}_{CO_2}) \times 5000 = (1 - 0.035) \times N^{2}$ (2)

Resolviendo las ecuaciones (1) y (2) se obtiene:

$$\mathbf{N^{2} = 6000} \qquad \mathbf{x^{8}_{CO_2} = 0.04 = (x^{7}_{CO_2} = x^{6}_{CO_2})}$$

Comprobando los resultados en la ecuación dependiente:

$$1000 + 5000 = N^{2}$$

$$6000 = 6000$$

Balances Globales:

CO_2: $$N^{7} \times 0.04 = 1000 \times 0.01$$

$$\mathbf{N^{7} = 250}$$

H_2: $$N^{7} \times (1 - 0.04) = 1000 \times 0.99 - 3\,r$$

$$\mathbf{r = 250}$$

Fe_2O_3: $$0 = N^{9}_{Fe_2O_3} - r$$

$$\mathbf{N^{9}_{Fe_2O_3} = 250}$$

Fe: $$N^{3}_{Fe} = 0 + 2\,r$$

$$\mathbf{N^{3}_{Fe} = 500}$$

H_2O: $$N^{5}_{H_2O} = 0 + 3\,r$$

$$\mathbf{N^{5}_{H_2O} = 750}$$

Los resultados se comprueban con el balance global de materia:

ENTRADA				SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**		**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
CO_2	10	440	→	CO_2	10	440
H_2	990	1980	→	H_2	240	480
Fe_2O_3	250	39923.5	→	H_2O	750	13500
			→	F_e	500	27923.5
Total		**42343.5**		**Total**		**42343.5**

Balances en el Reactor:

CO_2: $$x^4_{CO_2} \times N^4 = 0.035 \times 6000 \quad (1)$$

H_2: $$(1 - x^4_{CO_2} - x^4_{H_2O}) \times N^4 = (1 - 0.035) \times 6000 - 3 \times 250 \quad (2)$$

H_2O: $$x^4_{H_2O} \times N^4 = 0 + 3 \times 250 \quad (3)$$

Resolviendo el sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas:

$$\mathbf{N^4 = 6000} \qquad \mathbf{x^4_{CO_2} = 0.035}$$

$$\mathbf{x^4_{H_2O} = 0.125}$$

Corroborando en el balance de materia:

ENTRADA					SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**			**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
CO_2	210	9240	→	Reactor	CO_2	210	9240
H_2	5790	11580			H_2	5040	10080
Fe_2O_3	250	39923.5			H_2O	750	13500
					F_e	500	27923.5
Total		**60743.5**			**Total**		**60743.5**

Balances en el Divisor:

CO_2: $$N^6 \times 0.04 = 0.04 \times 250 + 0.04 \times 5000$$

$$\mathbf{N^6 = 5250}$$

Comprobando en el balance de hidrógeno del Condensador:

H_2: $$(1 - x^4_{CO_2} - x^4_{H_2O}) \times N^4 = (1 - x^6_{CO_2}) \times N^6$$

$$(1 - 0.035 - 0.125) \times 6000 = (1 - 0.04) \times 5250$$

$$5040 = 5040$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Mezclador:

Base de cálculo $N^1 = 1000$ kgmol

De R_1: $$N^8 = 5 \times 1000 \quad (1)$$

CO_2: $$1000 \times 0.01 + x^8_{CO_2} \times N^8 = 0.035 \times N^2 \quad (2)$$

H_2: $$1000 \times 0.99 + (1 - x^8_{CO_2}) \times N^8 = (1 - 0.035) \times N^2 \quad (3)$$

Globales:

CO_2: $$N^7 \times x^7_{CO_2} = 1000 \times 0.01 \quad (4)$$

H_2: $$N^7 \times (1 - x^7_{CO_2}) = 1000 \times 0.99 - 3\,r \quad (5)$$

Fe_2O_3: $$0 = N^9_{Fe_2O_3} - r \quad (6)$$

Fe: $$N^3_{Fe} = 0 + 2\,r \quad (7)$$

H_2O: $$N^5_{H_2O} = 0 + 3\,r \quad (8)$$

Reactor:

CO_2: $$x^4_{CO_2} \times N^4 = 0.035 \times N^2 \quad (9)$$

H_2: $$(1 - x^4_{CO_2} - x^4_{H_2O}) \times N^4 = (1 - 0.035) \times N^2 - 3 \times r \quad (10)$$

H_2O: $$x^4_{H_2O} \times N^4 = 0 + 3 \times r \quad (11)$$

Divisor:

CO_2: $$N^6 \times x^6_{CO_2} = N^7 \times x^7_{CO_2} + N^8 \times x^8_{CO_2} \quad (12)$$

H_2: $$(1 - x^6_{CO_2}) \times N^6 = (1 - x^7_{CO_2}) \times N^7 + (1 - x^8_{CO_2}) \times N^8 \quad (13)$$

De R_2: $$x^8_{CO_2} = x^6_{CO_2} \quad (14)$$

Resolviendo el sistema de 14 ecuaciones y 14 incógnitas, tenemos:

$N^8 = 5000$
$N^2 = 6000$
$x^8_{CO_2} = 0.04$
$N^7 = 250$
$r = 250$
$N^9_{Fe_2O_3} = 250$
$N^3_{Fe} = 500$

$N^5_{H_2O} = 750$
$N^4 = 6000$
$x^4_{CO_2} = 0.035$
$x^4_{H_2O} = 0.125$
$N^6 = 5250$
$x^7_{CO_2} = 0.04$
$x^6_{CO_2} = 0.04$

Para un flujo de 1000 kg en la corriente 9, se tendrá que:

$$\mathbf{N^9_{Fe_2O_3} = 250\ kgmol = 39925\ kg}$$

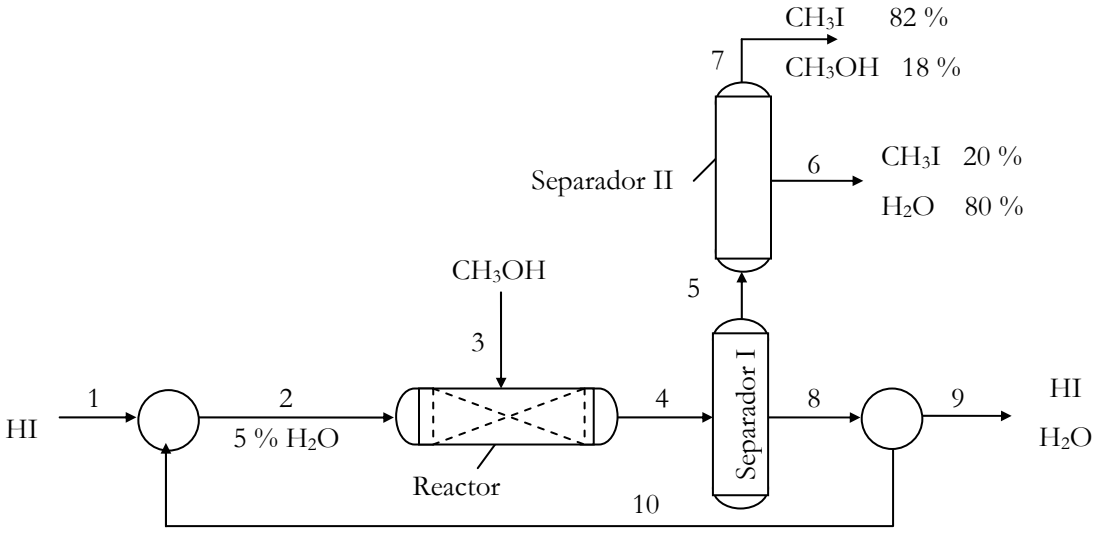
Y la relación de escalado para el cambio de base es:

$$\mathbf{N^7 = \left(\frac{1000\ kg}{39925\ kg} \times 250\ kgmol \right)} \qquad \mathbf{N^7 = 6.262\ kgmol}$$

3.17. El yoduro de metilo puede obtenerse por la reacción de ácido yodhídrico con un exceso de metanol, así:

$$\mathbf{HI + CH_3OH \longrightarrow CH_3I + H_2O}$$

En la figura de la siguiente página se presenta un proceso típico para la producción industrial de yoduro de metilo.



Las condiciones del proceso son:

1. **La alimentación al reactor contiene 2 moles de CH_3OH por mol de HI.**
2. **Se obtiene una conversión de 50% de HI en el reactor.**
3. **90% del H_2O que entra en el primer separador sale por la corriente 5.**
4. **Todas las composiciones están en base molar.**

¿Cuántas moles de CH_3I se producen por mol de alimentación fresca de HI?

SOLUCIÓN

Relaciones:

R_1: $N^3_{CH_3OH} = 2 \times 0.95 \times N^2$

R_2: X_{HI} en el reactor es 0.5

R_3: $0.9\ N^4_{H_2O} = N^5_{H_2O}$

R_4: Restricciones del divisor = (2 – 1) (2 – 1) = 1

Diagrama cuantitativo:

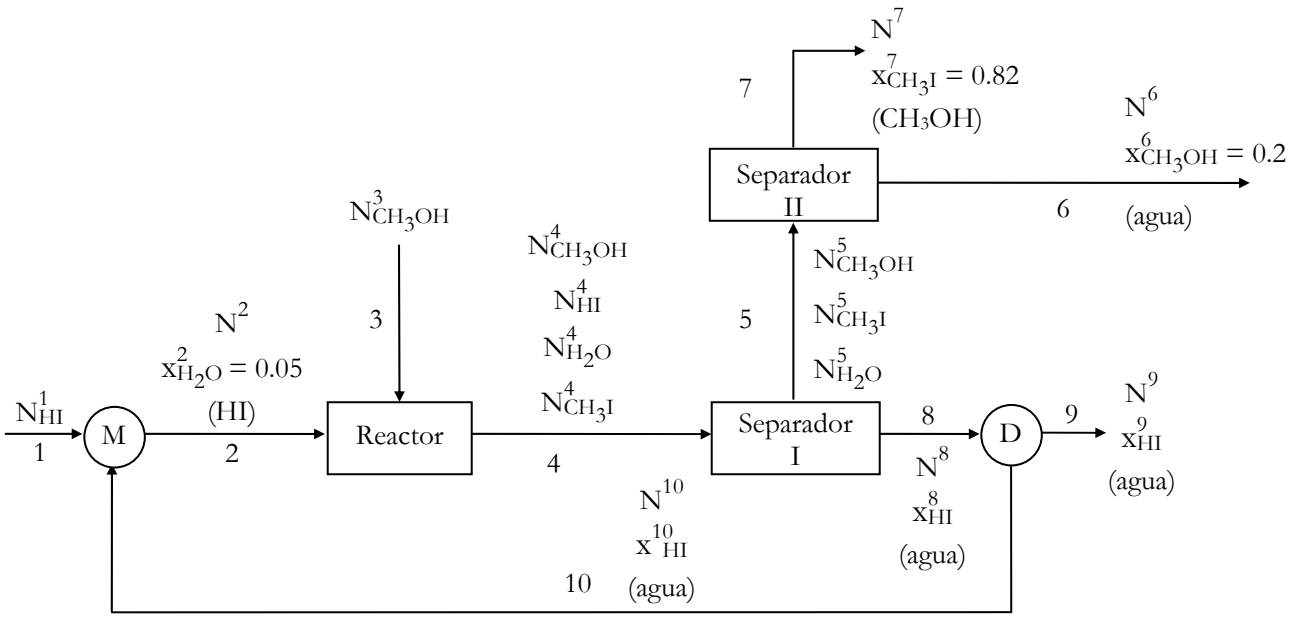


Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	Reactor	Separador I	Separador II	Divisor	Proceso	Global
NVI	5	7 + 1	9	7	6	21 + 1	8 + 1
NBMI	2	4	4	3	2	15	4
NFC	0	0	0	0	0	0	0
NCC	1	1	0	2	0	3	2
NRC R_1	–	1	–	–	–	1	–
R_2	–	1	–	–	–	1	–
R_3	–	–	1	–	–	1	–
R_4	–	–	–	–	1	1	–
G de L	**2**	**1**	**4**	**2**	**3**	**0**	**3**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 4 (N^{1}_{HI}, N^{2}, N^{10}, x^{10}_{HI})

Ecuaciones = 2 (balances)

G de L = 2

Reactor: Incógnitas = 7 (r, N^{2}, $N^{3}_{CH_3OH}$, $N^{4}_{CH_3OH}$, N^{4}_{HI}, N^{4}_{H2O}, $N^{4}_{CH_3I}$)

Ecuaciones = 4 (balances) + 2 (R_1, R_2)

G de L = 1

Separador I: Incógnitas = 9 ($N^{4}_{CH_3OH}$, N^{4}_{HI}, N^{4}_{H2O}, $N^{4}_{CH_3I}$, $N^{5}_{CH_3OH}$, $N^{5}_{CH_3I}$, N^{5}_{H2O}, N^{8}, x^{8}_{HI})

Ecuaciones = 4 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 4

Separador II: Incógnitas = 5 ($N^5_{CH_3OH}$, $N^5_{CH_3I}$, N^5_{H2O}, N^6, N^7)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 2

Divisor: Incógnitas = 6 (N^8, x^8_{HI}, N^9, x^9_{HI}, N^{10}, x^{10}_{HI})

Ecuaciones = 2 (balances) + 1 (R_4)

G de L = 3

Global: Incógnitas = 7 (r, N^1_{HI}, $N^3_{CH_3OH}$, N^6, N^7, N^9, x^9_{HI})

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 3

Tabla de Balances:

	Mezclador	**Reactor**	**Separador I**	**Separador II**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
CH_3OH	–	1	1	1	–	3	1
HI	1	1	1	–	1	4	1
H_2O	1	1	1	1	1	5	1
CH_3I	–	1	1	1	–	3	1
Total	**2**	**4**	**4**	**3**	**2**	**15**	**4**

Si se toma una base de cálculo en el reactor, sus grados de libertad se vuelven en cero, pero los grados de libertad del proceso quedan con –1, esto quiere decir que el proceso se encuentra sobre-especificado.

Al actualizar los grados de libertad encontraremos una unidad con grados de libertad negativos, o sea, sobre-especificada. Como ya se sabe, esta información conduce a una de las siguientes posibilidades:

1. Hay información redundante y contradictoria, no se pueden cumplir todas las condiciones del proceso.

2. La información es redundante, pero no contradictoria se cumple todas las condiciones del proceso y lo que sucede es que sobra información.

Estrategia de Solución:

1. Tomando base de cálculo en el reactor se conoce: r, N^2, $N^3_{CH_3OH}$, $N^4_{H_2O}$, N^4_{HI}, $N^4_{CH_3OH}$, $N^4_{CH_3I}$.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:

   Mezclador: G de L A = $2 - 1\ (N^2) = 1$

   Separador I: G de L A = $4 - 4\ (N^4_{H_2O}, N^4_{HI}, N^4_{CH_3OH}, N^4_{CH_3I}) = 0$

   Global: G de L A = $3 - 1\ (r) - 1\ (N^3_{CH_3OH}) = 1$

3. Resolviendo el Separador I se conoce: N^8, $x^8_{H_2O}$, $x^9_{H_2O}$, $x^{10}_{H_2O}$, $N^5_{CH_3I}$, $N^5_{H_2O,}$ $N^5_{CH_3OH}$.
4. Actualizando grados de libertad se encuentra que:

   Divisor: G de L A = $3 - 1\ (N^8) - 1\ (x^8_{H_2O}) = 1$

   Separador II: G de L A = $2 - 3\ (N^5_{CH_3I}, N^5_{H_2O,}\ N^5_{CH_3OH}.) = -1$

   Mezclador: G de L A = $1 - 1\ (x^{10}_{H_2O}) = 0$

   Global: G de L A = $1 - 1\ (x^9_{2O}) = 0$

   El Separador II queda sobre-especificado. Resolviendo esta unidad se puede comprobar si hay o no contradicción en la información que sobra.

   Las demás unidades Mezclador y Global quedan con cero grados de libertad.

CÁLCULOS:

Balance en el Reactor:

Base de cálculo: $\mathbf{N^3_{CH_3OH} = 100}$

De R_1: $N^3_{CH_3OH} = 2 \times 0.95 \times N^2$

$$\mathbf{N^2 = 52.632}$$

De R_2: $$X_{HI} = \frac{0.95\,N^2 - N^4_{HI}}{0.95\,N^2} = 0.5$$

$$N_{HI}^{4} = 0.95 \times 52.632 \times (1 - 0.5)$$

$$\mathbf{N_{HI}^{4} = 25}$$

HI: $N_{HI}^{4} = 0.95 \times 52.632 - r$

$$\mathbf{r = 25}$$

Alcohol: $N_{CH_3OH}^{4} = N_{CH_3OH}^{3} - r = 100 - 25$

$$\mathbf{N_{CH_3OH}^{4} = 75}$$

H_2O: $N_{H_2O}^{4} = 0.05 \times 52.632 + r = 2.632 + 25$

$$\mathbf{N_{H_2O}^{4} = 27.632}$$

CH_3I: $N_{CH_3I}^{4} = r$

$$\mathbf{N_{CH_3I}^{4} = 25}$$

Balances en el Separador I:

Alcohol: $N_{CH_3OH}^{5} = N_{CH_3OH}^{4}$

$$\mathbf{N_{CH_3OH}^{5} = 75}$$

CH_3I: $N_{CH_3I}^{5} = N_{CH_3I}^{4}$

$$\mathbf{N_{CH_3I}^{5} = 25}$$

De R_3: $0.9\, N_{H_2O}^{4} = N_{H_2O}^{5}$

$$\mathbf{N_{H_2O}^{5}} = 0.9 \times 27.632 = 24.869$$

HI: $N_{HI}^{8} = N_{HI}^{4} = 25$

H_2O: $N_{H_2O}^{8} = N_{H_2O}^{4} - N_{H_2O}^{5} = 27.632 - 24.869$

$$N_{H_2O}^{8} = 2.763$$

Sumando los flujos de la corriente 8:

$$\mathbf{N^{8} = 27.763}$$

Luego,

$$x_{HI}^{8} = \frac{N_{HI}^{8}}{N^{8}} = \frac{25}{27.763} = 0.9005$$

Conociendo las composiciones de H_2O en el Divisor:

$$\mathbf{x_{HI}^{8} = x_{HI}^{9} = x_{HI}^{10} = 0.9005}$$

Balance en el Separador II:

H_2O: $0.8 \times N^{6} = 24.869$

$$\mathbf{N^{6} = 31.086}$$

CH_3I: $0.82 \times N^{7} = 25$

$$\mathbf{N^{7} = 30.488}$$

Con los datos encontrados hasta ahora pueden efectuarse los balances totales y de alcohol en el Separador II. Corroborando con los resultados anteriores se puede determinar si hay o no información contradictoria en el proceso:

Total: $N^{6} + N^{7} = N_{CH_3OH}^{5} + N_{CH_3I}^{5} + N_{H_2O}^{5} = 124.869$

$$31.086 + 30.488 = 61.574 \neq 124.869$$

que, como puede verse, no se cumple.

Alcohol: $0.2 \times N^{6} + 0.18 \times N^{7} = N^{5}_{CH_3OH}$

$0.2 \times 31.086 + 0.18 \times 30.488 = 75$

$11.705 \neq 75$

Constituyendo así una contradicción.

Para que el problema quede especificado correctamente debe eliminarse un dato (realmente, puede eliminarse cualquiera, pero como no se ha estudiado arrastre de variables, no se puede hacer en el reactor).

Dejemos sin especificar la composición de la corriente 7; es decir, $x^{7}_{CH_3I}$ es desconocido.

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	Reactor	Separador I	Separador II	Divisor	Proceso	Global
NVI	5	7 + 1	9	7	6	21 + 1	8 + 1
NBMI	2	4	4	3	2	15	4
NFC	0	0	0	0	0	0	0
NCC	1	1	0	1	0	2	1
NRC R_1	–	1	–	–	–	1	–
R_2	–	1	–	–	–	1	–
R_3	–	–	1	–	–	1	–
R_4	–	–	–	–	1	1	–
G de L	**2**	**1**	**4**	**3**	**3**	**1**	**4**

Con esta corrección, se continúa solucionando de la siguiente forma:

5. Se continúan con los balances en el Separador II y resolviendo se conoce: $x^{7}_{CH_3I,}\ N^{7}, N^{6}$. Se agotan los balances de CH_3OH, CH_3I.

6. Reconfirmando Grados de libertad:
   Mezclador: G de L A = 0 – 0 = 0

7. Resolviendo el Mezclador se conoce: $N^{1}_{HI,}\ N^{10}$. Se agota el balance de HI.

8. Actualizando Grados de Libertad:
   Divisor: G de L A = 1 – 1 (N^{10}) + 1 (balance agotado: HI) = 0
   Global: G de L A = 1 – 3 (N^{1}_{HI},N^{6},N^{7}) – 1 ($x^{3}_{CH_3I}$) + 3 (balances agotados)= 0

9. Resolviendo el Divisor se conocen todas las incógnitas del proceso, comprobándose en el Global.

Balance en el Separador II:

H_2O: $0.8 \times N^6 = 24.869$

$$\mathbf{N^6 = 31.086}$$

CH_3I: $x^7_{CH_3I} \times N^7 = 25$ (1)

Alcohol: $0.2 \times N^6 + (1 - x^7_{CH_3I}) \times N^7 = N^5_{CH_3OH}$

$0.2 \times 31.086 + (1 - x^7_{CH_3I}) \times N^7 = 75$ (2)

Resolviendo el sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas, tenemos:

$$\mathbf{N^7 = 93.783} \qquad \mathbf{x^7_{CH_3I} = 0.2666}$$

Balances en el Mezclador:

Total: $N^1_{HI} + N^{10} = N^2 = 52.632$ (3

HI: $N^1_{HI} + 0.9005 \times N^{10} = 0.95 \times N^2 = 0.95 \times 52.632$

$N^1_{HI} + 0.9005 \times N^{10} = 50$ (4)

Resolviendo las dos ecuaciones:

$$\mathbf{N^1_{HI} = 26.184} \qquad \mathbf{N^{10} = 26.448}$$

Balances en el Divisor:

Total: $N^9 = N^8 - N^{10} = 27.763 - 26.448$

$$\mathbf{N^9 = 1.315}$$

Comprobando los resultados obtenidos en el Balance Global de HI:

HI: $0.9005 \times N^{9} = N_{HI}^{1} - r$

$1.1842 = 26.184 - 25 = 1.184$

Finalmente, la respuesta que se pide es:

$$\frac{\text{moles de } CH_3I \text{ producidos}}{\text{moles de alimentación fresca de HI}} = \left(\frac{25}{26.184}\right) = 0.9548$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Reactor:

Base de cálculo: $\mathbf{N_{CH_3OH}^{3} = 100}$

De R_1: $N_{CH_3OH}^{3} = 2 \times 0.95 \times N^{2}$ (1)

De R_2: $X_{HI} = \frac{0.95\,N^{2} - N_{HI}^{4}}{0.95\,N^{2}} = 0.5$ (2)

HI: $N_{HI}^{4} = 0.95 \times N^{2} - r$ (3)

Alcohol: $N_{CH_3OH}^{4} = N_{CH_3OH}^{3} - r$ (4)

H_2O: $N_{H_2O}^{4} = 0.05 \times N^{2} + r$ (5)

CH_3I: $N_{CH_3I}^{4} = r$ (6)

Separador I:

Alcohol: $N_{CH_3OH}^{5} = N_{CH_3OH}^{4}$ (7)

CH_3I: $N_{CH_3I}^{5} = N_{CH_3I}^{4}$ (8)

De R_3: $0.9\,N_{H_2O}^{4} = N_{H_2O}^{5}$ (9)

HI: $x_{HI}^{8} \times N^{8} = N_{HI}^{4}$ (10)

H_2O: $(1 - x_{HI}^{8}) \times N^{8} = N_{H_2O}^{4} - N_{H_2O}^{5}$ (11)

De R_4: $x_{HI}^{8} = x_{HI}^{10}$ (12)

Separador II:

H_2O: $0.8 \times N^{6} = N_{H_2O}^{5}$ (13)

CH_3I: $0.82 \times N^{7} = N_{CH_3I}^{5}$ (14)

Mezclador:

Total: $N_{HI}^{1} + N^{10} = N^{2}$ (15)

HI: $N_{HI}^{1} + x_{HI}^{10} \times N^{10} = 0.95 \times N^{2}$ (16)

Divisor:

Total: $N^{9} = N^{8} - N^{10}$ (17)

Así, omitiendo la ecuación del balance de alcohol en el Separador II, tendremos un sistema de 17 ecuaciones con 17 incógnitas:

$N_{HI}^{1} = 26.190476$

$N^{2} = 52.63157895$

$N_{HI}^{4} = 25$

$r = 25$

$N_{CH_3OH}^{4} = 75$

$N_{H_2O}^{4} = 27.63157895$

$N_{CH_3I}^{4} = 25$

$N_{CH_3OH}^{5} = 75$

$N_{CH_3I}^{5} = 25$

$N_{H_2O}^{5} = 24.868421$

$N^{8} = 27.7631579$

$x_{HI}^{8} = 0.900474$

$x_{HI}^{10} = 0.900474$

$N^{6} = 31.085526$

$N^{7} = 30.487805$

$N^{9} = 1.322055$

$N_{HI}^{10} = 26.441103$

Si se utilizan los valores hallados en el balance de alcohol del Separador II, se encuentra que el resultado es contradictorio:

Alcohol: $0.2 \times N^{6} + 0.18 \times N^{7} = N^{5}_{CH_3OH}$

$0.2 \times 31.086 + 0.18 \times 30.488 = 75$

$11.705 \neq 75$

Quitando el valor de la composición indicada se siguen planteando y solucionando las ecuaciones según el orden establecido en la estrategia de solución:

Separador II:

H_2O: $0.8 \times N^{6} = N^{5}_{H_2O}$ (13a)

CH_3I: $x^{7}_{CH_3I} \times N^{7} = N^{5}_{CH_3I}$ (14a)

Alcohol: $0.2 \times N^{6} + (1 - x^{7}_{CH_3I}) \times N^{7} = N^{5}_{CH_3OH}$ (15a)

Mezclador:

Total: $N^{1}_{HI} + N^{10} = N^{2}$ (16a)

HI: $N^{1}_{HI} + x^{10}_{HI} \times N^{10} = 0.95 \times N^{2}$ (17a)

Divisor:

Total: $N^{9} = N^{8} - N^{10}$ (18a)

Resolviendo el sistema de 18 ecuaciones con 18 incógnitas:

$N^{1}_{HI} = 26.190476$
$N^{2} = 52.63157895$
$N^{4}_{HI} = 25$
$r = 25$
$N^{4}_{CH_3OH} = 75$
$N^{4}_{H_2O} = 27.63157895$
$N^{4}_{CH_3I} = 25$
$N^{5}_{CH_3OH} = 75$
$N^{5}_{CH_3I} = 25$

$N^{5}_{H_2O} = 24.868421$
$N^{8} = 27.7631579$
$x^{8}_{HI} = 0.900474$
$x^{10}_{HI} = 0.900474$
$N^{6} = 31.085526$
$N^{7} = 93.782895$
$x^{7}_{CH_3I} = 0.266573$
$N^{9} = 1.322055$
$N^{10}_{HI} = 26.441103$

Comprobando los resultados obtenidos en el Balance Global de HI:

$$\text{HI:} \qquad 0.900474 \times N^{9} = N_{HI}^{1} - r$$

$$0.900474 \times 1.322055 = 26.190476 - 25$$

$$1.19047615 = 1.190476$$

Finalmente:

$$\frac{\text{moles de } CH_3I \text{ producidos}}{\text{moles de alimentación fresca de HI}} = \left(\frac{25}{26.190476}\right) = 0.954545$$

3.18. Una mezcla que contiene 68.4 % de H_2, 22.6 de N_2 y 9 % de CO_2, reacciona de acuerdo con las ecuaciones:

$$\mathbf{N_2 + 3\ H_2 \longrightarrow 2\ NH_3}$$

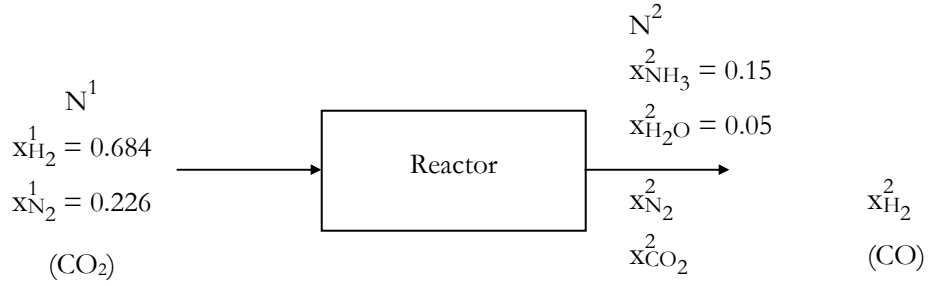
$$\mathbf{CO_2 + H_2 \longrightarrow CO + H_2O}$$

hasta que la mezcla contiene 15 % de NH_3 y 5 % de H_2O.

Calcule las fracciones mol de N_2, H_2, CO_2 y CO.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



En el proceso hay dos reacciones, por tanto intervendrán dos velocidades de reacción. Las ecuaciones son:

$$N_2 + 3\ H_2 \longrightarrow 2\ NH_3 \qquad r_1$$

$$CO_2 + H_2 \longrightarrow CO + H_2O \qquad r_2$$

Tabla de Grados de Libertad:

NVI		9 + 2
NBMI	6	
NFC	0	
NCC	4	
NRC	0	– 10
G de L		**1**
Base		**– 1**

Tomando una base el proceso queda especificado correctamente, conformándose un sistema de seis ecuaciones con seis incógnitas.

CÁLCULOS:

Base de cálculo: Sea $N^1 = 100$

NH_3: $$0.15\, N^2 = 2\, r_1 \quad (1)$$

H_2O: $$0.05\, N^2 = r_2 \quad (2)$$

H_2: $$x_{H_2}^2 \times N^2 = 68.40 - 3\, r_1 - r_2 \quad (3)$$

N_2: $$x_{N_2}^2 \times N^2 = 22.60 - r_1 \quad (4)$$

CO_2: $$x_{CO_2}^2 \times N^2 = 9 - r_2 \quad (5)$$

CO: $$(0.8 - x_{H_2}^2 - x_{N_2}^2 - x_{CO_2}^2) \times N^2 = r_2 \quad (6)$$

Resolviendo el sistema se encuentra que:

$$\mathbf{N^2 = 86.9566} \qquad \mathbf{r_1 = 6.5217} \qquad \mathbf{r_2 = 4.3478}$$

$$\mathbf{x_{CO2}^2 = 0.0535} \qquad \mathbf{x_{H_2}^2 = 0.5116} \qquad \mathbf{x_{N_2}^2 = 0.1849} \qquad \mathbf{x_{CO}^2 = 0.059}$$

Esta solución se puede comprobar encontrando las masas de cada sustancia a la entrada y a la salida, cuya suma debe conservarse:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
H_2	68.4	136.8
N_2	22.6	632.8
CO_2	9.0	396.0
Total		**1165.60**

→ Reactor →

SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
NH_3	13.0434	221.74
H_2O	4.3478	78.26
N_2	16.0783	450.19
H_2	44.4871	88.97
CO_2	4.6522	204.70
CO	4.3478	121.74
Total		**1165.60**

3.19. Es posible obtener el acetaldehído, CH_3CHO, por deshidrogenación catalítica de etanol, C_2H_5OH, mediante la reacción:

$$C_2H_5OH \longrightarrow CH_3CHO + H_2$$

ocurre también, sin embargo, una reacción paralela que produce acetato de etilo:

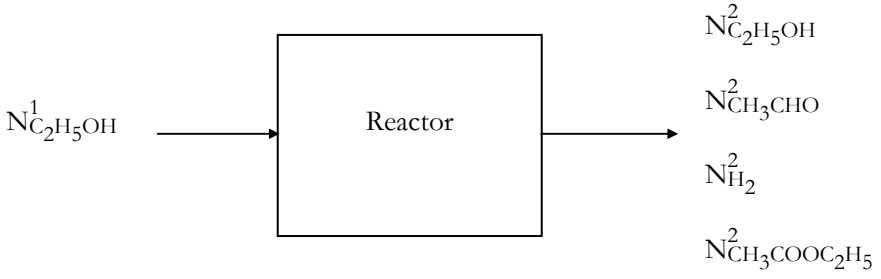
$$2\ C_2H_5OH \longrightarrow CH_3COOC_2H_5 + 2\ H_2$$

Supóngase que en un reactor determinado se ajustan las condiciones, de modo que se obtiene una conversión de etanol de 95 %, con un rendimiento de 80 % de acetaldehído.

Calcule la composición del producto del reactor, si la alimentación es etanol puro.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Las reacciones y sus velocidades son:

$$C_2H_5OH \longrightarrow CH_3CHO + H_2 \qquad r_1$$

$$2\ C_2H_5OH \longrightarrow CH_3COOC_2H_5 + 2\ H_2 \qquad r_2$$

Relaciones:

R_1: Conversión del 95 %.

R_2: Rendimiento del 80 %.

Tabla de Grados de Libertad:

NVI		5 + 2
NBMI	4	
NFC	0	
NCC	0	
NRC	2	– 6
G de L		**1**

Tomando una base el proceso queda correctamente especificado.

CÁLCULOS:

Base de cálculo: **Sea $N^1_{C_2H_5OH} = 100$**

De la conversión:

$$N^2_{C_2H_5OH} = (1 - X_s)\, N^1_{C_2H_5OH} = (1 - 0.95) \times 100$$

$$\mathbf{N^2_{C_2H_5OH} = 5}$$

Ahora, si $r_2 = 0$, el flujo de acetaldehído a la salida, $N^2_{CH_3CHO}$, es máximo, por tanto, mediante un balance de C_2H_5OH:

$$5 = 100 - r_1 - 2\,r_2 = 100 - r_1$$

$$\mathbf{r_1 = 95}$$

y,

$$\mathbf{N^2_{CH_3CHO}\,(máximo) = 95}$$

Del rendimiento:

$$\left(\frac{N^2_{CH_3CHO}}{N^2_{CH_3CHO}\ \text{máximo}}\right) = 0.8$$

Reemplazando:

$$N^2_{CH_3CHO} = 0.8 \times 95$$

$$\mathbf{N^2_{CH_3CHO} = 76}$$

Los balances son:

CH_3CHO: $N^2_{CH_3CHO} = 76 = 0 + r_1$

$$\mathbf{r_1 = 76}$$

C_2H_5OH: $N^2_{C_2H_5OH} = 5 = 100 - r_1 - 2\,r_2$

$$\mathbf{r_2 = 9.5}$$

H_2: $N^2_{H_2} = r_1 + 2\,r_2$

$$N^2_{H_2} = 76 + 2 \times 9.5$$

$$\mathbf{N^2_{H_2} = 95}$$

$CH_3COOC_2H_5$: $N^2_{CH_3COOC_2H_5} = r_2$

$$\mathbf{N^2_{CH_3COOC_2H_5} = 9.5}$$

Sumando el flujo de los componentes:

$$\mathbf{N^2 = 185.5}$$

Calculando las fracciones molares se encuentra que:

$$\mathbf{(x^2_{C_2H_5OH}, x^2_{CH_3CHO}, x^2_{H_2}, x^2_{CH_3COOC_2H_5}) = (0.026954; 0.4097; 0.51213; 0.051213)}$$

Comprobando los resultados mediante el cálculo de la masa total a la entrada y a la salida se encuentra que:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
C_2H_5OH	100	4600
Total		**4600**

→ Reactor →

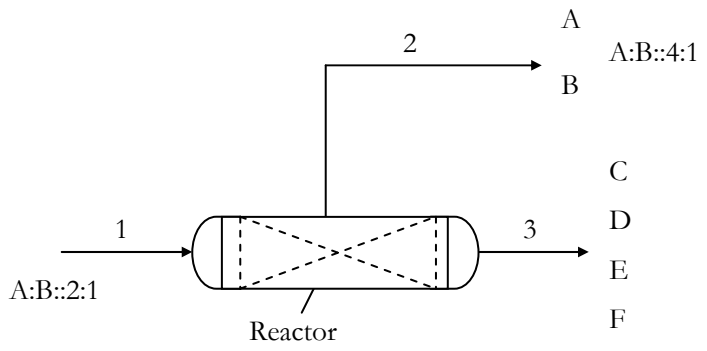
SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
C_2H_5OH	5.0	230
CH_3CHO	76.0	3344
H_2	95.0	190
$CH_3COOC_2H_5$	9.5	836
Total		**4600**

3.20. El producto C se obtiene de los reactivos A y B, de acuerdo con las tres reacciones siguientes:

$$\mathbf{2\ A + B \longrightarrow 2\ D + E}$$

$$\mathbf{A + D \longrightarrow 2\ C + E}$$

$$\mathbf{C + 2\ B \longrightarrow 2\ F}$$



Con una proporción en la alimentación de dos moles de A por mol de B, y una conversión de A del 80 %, se obtiene una mezcla como producto que contiene 4 moles de A por mol de B, y 6 moles totales combinadas de los productos C, D, E y F, por mol de reactivos individuales A y B, como se muestra en la figura.

Suponiendo que el problema está especificado correctamente y usando una alimentación de 200 moles/h de A.

a. Calcule las tres velocidades de reacción y los flujos de salida del reactor.

b. Calcule el rendimiento fraccional de C a partir de A.

SOLUCIÓN

a. Calcule las tres velocidades de reacción y los flujos de salida del reactor.

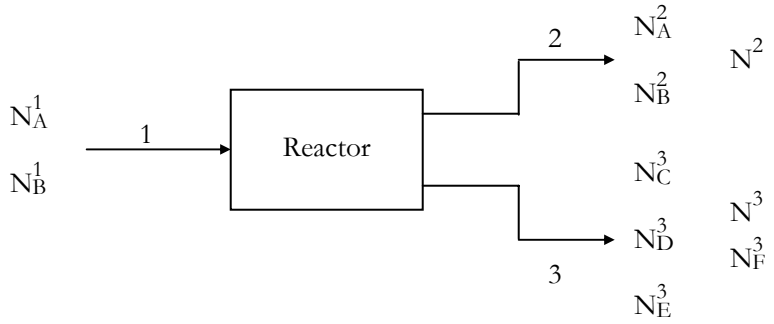
Las reacciones y sus velocidades son:

$$2\,A + B \longrightarrow 2\,D + E \qquad r_1$$

$$A + D \longrightarrow 2\,C + E \qquad r_2$$

$$C + 2\,B \longrightarrow 2\,F \qquad r_3$$

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

$$R_1: \frac{N_A^1}{N_B^1} = 2 \qquad R_2: X_A = 80\,\% \qquad R_3: \frac{N_A^2}{N_B^2} = 4$$

$$R_4: \left(\frac{N_C^3 + N_D^3 + N_E^3 + N_F^3}{N_A^2 + N_B^2}\right) = \frac{N^3}{N^2} = 6$$

Tabla de Grados de Libertad:

NVI		8 + 3
NBMI	6	
NFC	0	
NCC	0	
NRC	4	– 10
G de L		**1**

Tomando una base el proceso queda correctamente especificado.

CÁLCULOS:

Base de cálculo: $N_A^1 = 200$

De R_1: $200 = 2 \times N_B^1$

$$\mathbf{N_B^1 = 100}$$

De R_2: $N_A^2 = (1 - 0.8) \times 200$

$$\mathbf{N_A^2 = 40}$$

De R_3: $N_B^2 = (40/4)$

$$\mathbf{N_B^2 = 10}$$

Sumando los flujos de la corriente 2:

$$\mathbf{N^2 = 50}$$

y,

De R_4: $N^3 = 6 \times N^2 = 6 \times 50$

$$\mathbf{N^3 = 300}$$

Luego:

$$N_C^3 + N_D^3 + N_E^3 + N_F^3 = 300 \quad (1)$$

Los balances son:

Balance de A: $40 = 200 - 2r_1 - r_2$ (2)

Balance de B: $10 = 100 - r_1 - 2r_3$ (3)

Balance de C: $N_C^3 = 2r_2 - r_3$ (4)

Balance de D: $N_D^3 = 2r_1 - r_2$ (5)

Balance de E: $N_E^3 = r_1 + r_2$ (6)

Balance de F: $N_F^3 = 2r_3$ (7)

Resolviendo el sistema de 7 ecuaciones se encuentra que:

$$\mathbf{r_1 = 43.33} \qquad \mathbf{r_2 = 73.33} \qquad \mathbf{r_3 = 23.33} \qquad \mathbf{N_C^3 = 123.33}$$

$$\mathbf{N_D^3 = 116.66} \qquad \mathbf{N_E^3 = 13.33} \qquad \mathbf{N_F^3 = 46.66}$$

b. Calcule el rendimiento fraccional de C a partir de A.

$$\mathbf{Rendimiento} = \left(\frac{\mathbf{123.33}}{\mathbf{160}} \times \mathbf{100}\right) = \mathbf{77.083\ \%}$$

3.21. El disulfuro de carbono se utiliza en la fabricación de rayón y celofán, y en la producción de tetracloruro de carbono.

En el proceso preferido generalmente, se hace reaccionar vapor de azufre con metano, según las reacciones:

$$\mathbf{CH_4 + 4\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2S}$$

$$\mathbf{CH_4 + 2\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2}$$

$$\mathbf{CH_4 + 2\ H_2S \longrightarrow CS_2 + 4\ H_2}$$

Para una alimentación que contiene 4 moles de azufre por mol de metano, calcule la composición del producto sise obtienen conversiones de 90 % de metano y 70 % de azufre.

SOLUCIÓN

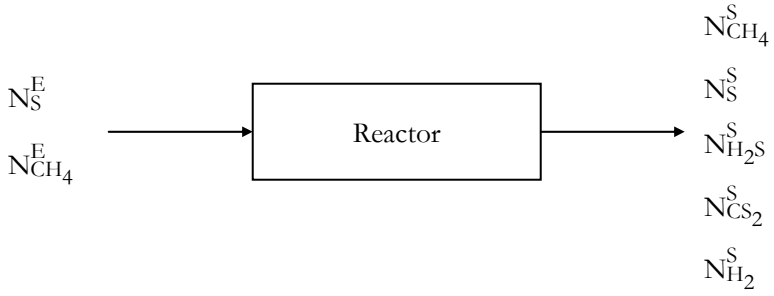
Las reacciones y sus velocidades son:

$$CH_4 + 4\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2S \qquad r_1$$

$$CH_4 + 2\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2 \qquad r_2$$

$$CH_4 + 2\ H_2S \longrightarrow CS_2 + 4\ H_2 \qquad r_3$$

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

$$R_1: \frac{N_S^{Entrada}}{N_{CH_4}^{Entrada}} = 4 \qquad R_2: X_{CH_4} = 90\ \% \qquad R_3: X_S = 70\ \%$$

Tabla de Grados de Libertad:

NVI		7 + 3
NBMI	5	
NFC	0	
NCC	0	
NRC	3	– 8
G de L		**2**

Tomando una base de cálculo los grados de libertad del proceso quedan valiendo 1. Puede investigarse si las tres reacciones son independientes mediante el análisis del arreglo estequiométrico:

	1a. Reacción	**2a. Reacción**	**3a. Reacción**
CH_4	– 1	– 1	– 1
S	– 4	– 2	0
CS_2	1	1	1
H_2S	2	0	– 2
H_2	0	2	4

Con base en el arreglo estequiométrico y mediante el procedimiento de reducción de éste, se encuentra que:

$$\begin{matrix} -1 & -1 & -1 \\ -4 & -2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 4 \end{matrix} \qquad \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ -4 & 1 & 0 \end{matrix}$$

El hecho de que una de las columnas se reduzca a ceros significa que el sistema sólo tiene dos reacciones independientes.

Estas se pueden representar, de acuerdo con los coeficientes de las dos columnas del arreglo reducido, como:

$$CS_2 + 4\,H_2 \longrightarrow CH_4 + 2\,H_2S \qquad r_1$$

$$H_2S \longrightarrow S + H_2 \qquad r_2$$

Debe advertirse que no constituyen el único sistema de ecuaciones posible. Un arreglo estequiométrico diferente, originado al colocar las reacciones en otro orden, puede conducir a otras ecuaciones diferentes. Lo importante es que cualquier par de ellas, obtenidas de esta manera o mediante otro análisis, pueden utilizarse para resolver el problema de balance.

Con solo dos ecuaciones independientes, el proceso tiene un grado de libertad y puede tomarse una base de cálculo para resolver el problema:

CÁLCULOS:

Base de cálculo: **Sea $N_S^E = 100$**

De R_1: $\mathbf{N_{CH_4}^E = 25}$

De las conversiones: $N_{CH_4}^S = 25 \times (1 - 0.9)$

$\mathbf{N_{CH_4}^S = 2.5}$

$N_S^S = 100 \times (1 - 0.7)$

$\mathbf{N_S^S = 30}$

Los balances son:

CH_4: $2.5 = 25 + r_1$

$\mathbf{r_1 = -22.5}$

Balance de S: $30 = 100 + r_2$

$\mathbf{r_2 = -70}$

El signo negativo en las velocidades de reacción indica que ellas ocurren en el sentido contrario y, si bien es cierto pueden no ser reales, representan correctamente el proceso para evaluar el balance de materia.

Las reacciones, en sentido directo, son:

$$CH_4 + 2\,H_2S \longrightarrow CS_2 + 4\,H_2 \qquad r_1$$

$$S + H_2 \longrightarrow H_2S \qquad r_2$$

Continuando con los balances:

H_2S: $N^S_{H_2S} = r_2 - 2\,r_1 = (70 - 2 \times 22.5)$

$$\mathbf{N^S_{H_2S} = 25}$$

CS_2: $N^S_{CS_2} = r_1 = 22.5$

$$\mathbf{N^S_{CS_2} = 22.5}$$

H_2: $N^S_{H_2} = (4\,r_1 - r_2) = (4 \times 22.5 - 70)$

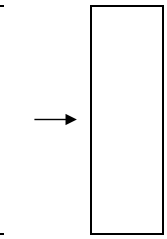
$$\mathbf{N^S_{H_2S} = 20}$$

A partir de estos datos se encuentra que:

$$\mathbf{(x_{CH_4}, x_S, x_{H_2S}, x_{CS_2}, x_{H_2}) = (0.025; 0.30; 0.25; 0.225; 0.20)}$$

Los resultados se comprueban hallando la suma de las masas de los componentes a la entrada y a la salida, como se muestra en la siguiente tabla:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
S	100	3200
CH_4	25	400
Total		**3600**



SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
CH_4	2.5	40
S	30.0	960
H_2S	25.0	850
CS_2	22.5	1710
H_2	20.0	40
Total		**3600**

La reducción del arreglo, tal como se hizo, es la mejor forma para determinar si las reacciones de un sistema son independientes. sin embargo, en algunos casos puede observarse fácilmente la independencia o no de ellas y proceder a eliminar la o las reacciones dependientes.

Para este problema las reacciones son:

$$CH_4 + 4\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2S \quad (1)$$

$$CH_4 + 2\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2 \quad (2)$$

$$CH_4 + 2\ H_2S \longrightarrow CS_2 + 4\ H_2 \quad (3)$$

Si se multiplica la ecuación (2) por 2 y de ella se resta la ecuación (3) se encuentra que:

$$2\ CH_4 + 4\ S \longrightarrow 2\ CS_2 + 4\ H_2 \quad (2a)$$

$$CH_4 + 2\ H_2S \longrightarrow CS_2 + 4\ H_2 \quad (3)$$

$$CH_4 + 4\ S - 2\ H_2S \longrightarrow CS_2$$

la cual reorganizada conduce a:

$$CH_4 + 4\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2S \quad (1)$$

o sea la ecuación (1), lo que demuestra, de nuevo, que de las tres ecuaciones sólo dos son independientes.

Como se planteaba anteriormente, otro par de ecuaciones (obtenidas por otro análisis o arreglo diferentes) también pueden ser utilizadas para solucionar el problema de balance de materia. Para ilustrar este hecho se resolverá el problema con otro par de ecuaciones.

Las reacciones son

$$CH_4 + 2\ S \longrightarrow CS_2 + 2\ H_2 \quad r_1$$

$$CH_4 + 2\ H_2S \longrightarrow CS_2 + 4\ H_2 \quad r_2$$

La Tabla de Grados de Libertad no se altera y tomando la misma base se tiene que:

Base de cálculo: Sea $N_S^E = 100$

De R_1: $N_{CH_4}^E = 25$

De las conversiones:

$$N^{S}_{CH_4} = N^{E}_{CH_4} \times (1 - 0.9)$$

$$N^{S}_{CH_4} = 25 \times (1 - 0.9)$$

$$\mathbf{N^{S}_{CH_4} = 2.5}$$

$$N^{S}_{S} = 100 \times (1 - 0.7)$$

$$\mathbf{N^{S}_{S} = 30}$$

Los balances son:

Balance de S: $30 = 100 - 2\ r_1$

$$\mathbf{r_1 = 35}$$

CH_4: $2.5 = 25 - 35 - r_2$

$$\mathbf{r_2 = -12.5}$$

CS_2: $N^{S}_{CS_2} = 35 - 12.5$

$$\mathbf{N^{S}_{CS_2} = 22.5}$$

H_2: $N^{S}_{H_2} = 2 \times 35 - 4 \times 12.5$

$$\mathbf{N^{S}_{H_2S} = 20}$$

H_2S: $N^{S}_{H_2S} = -2 \times (-12.5)$

$$\mathbf{N^{S}_{H_2S} = 25}$$

Todos los flujos de salida concuerdan con los encontrados en la solución anterior, como era de esperarse. Obviamente, no se pueden comparar las velocidades de reacción.

3.22. La hidrodesalquilación es un proceso en el cual se eliminan cadenas laterales (de grupos alquilo) de compuestos aromáticos mediante la reacción con hidrógeno, para formar el compuesto aromático original.

Por ejemplo, puede convertirse tolueno a benceno:

$$C_6H_5CH_3 + H_2 \longrightarrow C_6H_6 + CH_4$$

Puede convertirse xileno a tolueno:

$$C_6H_4(CH_3)_2 + H_2 \longrightarrow C_6H_5CH_3 + CH_4$$

El seudocumeno y otros hidrocarburos C_9 que contienen tres grupos CH_3 pueden convertirse a xilenos:

$$C_6H_3(CH_3)_3 + H_2 \longrightarrow C_6H_4(CH_3)_2 + CH_4$$

En una aplicación determinada, se hace reaccionar con hidrógeno una corriente de reformado de una refinería, que contiene 5 % de benceno, 20 % de tolueno, 35 % de xileno y 40 % de hidrocarburos C_9.

Si se utilizan 5 moles de H_2 por mol de alimentación, se logran conversiones del 80 % para el tolueno, 74 % para el xileno y 70 % para los hidrocarburos C_9.

Se observa que la corriente de producto contiene una pequeña cantidad, 0.1 % de bifenilo, indicando que ocurrió hasta cierto punto la reacción paralela:

$$2\ C_6H_6 \longrightarrow C_6H_5C_6H_5 + H_2$$

Calcule la composición completa de la corriente de salida del reactor.

SOLUCIÓN

Las reacciones y sus velocidades son:

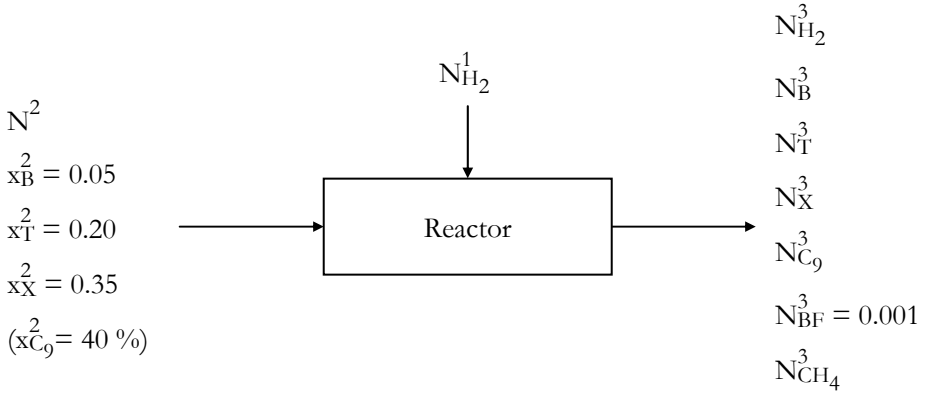
$$C_6H_5CH_3 + H_2 \longrightarrow C_6H_6 + CH_4 \qquad r_1$$

$$C_6H_4(CH_3)_2 + H_2 \longrightarrow C_6H_5CH_3 + CH_4 \qquad r_2$$

$$C_6H_3(CH_3)_3 + H_2 \longrightarrow C_6H_4(CH_3)_2 + CH_4 \qquad r_3$$

$$2\ C_6H_6 \longrightarrow C_6H_5C_6H_5 + H_2 \qquad r_4$$

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: $\dfrac{N_{H_2}^1}{N^2} = 5$ R_2: $X_T = 80\ \%$

R_3: $X_X = 74\ \%$ R_4: $X_{C_9} = 70\ \%$

Tabla de Grados de Libertad:

NVI		12 + 4
NBMI	7	
NFC	0	
NCC	4	
NRC	4	– 15
G de L		**1**

CÁLCULOS:

Base de cálculo: **Sea $N^2 = 100$**

De acuerdo con la composición a la entrada:

$N_B^2 = 5$ **$N_X^2 = 35$** **$N_T^2 = 20$** **$N_{C_9}^2 = 40$**

De R_1: **$N_{H_2}^1 = 500$**

De las conversiones:

$$N_T^3 = 20 \times (1 - 0.8)$$

$$\mathbf{N_T^3 = 4.0}$$

$$N_X^3 = 35 \times (1 - 0.74)$$

$$\mathbf{N_X^3 = 9.1}$$

$$N_{C_9}^3 = 40 \times (1 - 0.7)$$

$$\mathbf{N_{C_9}^3 = 12}$$

Los balances son:

Tolueno: $4 = 20 - r_1 + r_2$ (1)

Xileno: $9.1 = 35 - r_2 + r_3$ (2)

C_9: $12 = 40 - r_3$ (3)

Resolviendo el sistema formado por las ecuaciones (1), (2) y (3):

$$\mathbf{r_3 = 28} \qquad \mathbf{r_2 = 53.9} \qquad \mathbf{r_1 = 69.9}$$

Continuando con los balances:

CH_4: $N_{CH_4}^3 = 28 + 53.9 + 69.9$

$$\mathbf{N_{CH_4}^3 = 151.80}$$

C_6H_6: $N_{C_6H_6}^3 = 5 + r_1 - 2\,r_4 = 74.9 - 2\,r_4$

CH_4: $N_{H_2}^3 = 500 - r_1 - r_2 - r_3 + r_4$

$$N_{H_2}^3 = 348.2 + r_4$$

Bifenilo: $N_{BF}^3 = r_4$

Al sumar sus componentes se obtiene el flujo total de la corriente 3 (note que se anula r_4):

$$\mathbf{N^3 = 600}$$

de la cual 0.1 % es bifenilo, por tanto:

$$\mathbf{N^3_{BF} = 0.6}$$

De esta forma se llega a que:

$$\mathbf{r_4 = 0.6} \qquad \mathbf{N^3_{H_2} = 348.8} \qquad \mathbf{N^3_{C_6H_6} = 73.7}$$

Y con base en las moles que salen de cada componente, la fracción molar de la corriente de salida es:

$$\mathbf{x_T = 0.00667} \qquad \mathbf{x_X = 0.01527} \qquad \mathbf{x_{C_9} = 0.02} \qquad \mathbf{x_{CH_4} = 0.253}$$

$$\mathbf{x_{BF} = 0.001} \qquad \mathbf{x_{H_2} = 0.58133} \qquad \mathbf{x_{C_6H_6} = 0.12283}$$

De nuevo puede efectuarse el cálculo de las masas totales a la entrada y a la salida para corroborar los resultados:

ENTRADA					**SALIDA**		
Sustancia	**Moles**	**Masa**			**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
						348.8	697.6
H_2	500	1000		→	Benceno	73.7	5748.6
Benceno	5	390			Tolueno	4.0	368.0
Xileno	35	3710	→ Reactor	→	Xileno	9.1	964.6
C_3	40	4800			C_9	12.0	1440.0
Tolueno	20	1840		→	Bifenilo	0.6	92.4
					CH_4	151.8	2428.8
Total		**1740**			**Total**		**1740.0**

3.23. En la industria del ácido sulfúrico, el nombre óleum se utiliza para un ácido 100 % puro que contiene SO_3 libre sin reaccionar disuelto en el ácido.

Por ejemplo, un óleum de 20 % contiene 20 lb de SO_3 en 80 lb de ácido al 100 %, por cada 100 lb de mezcla.

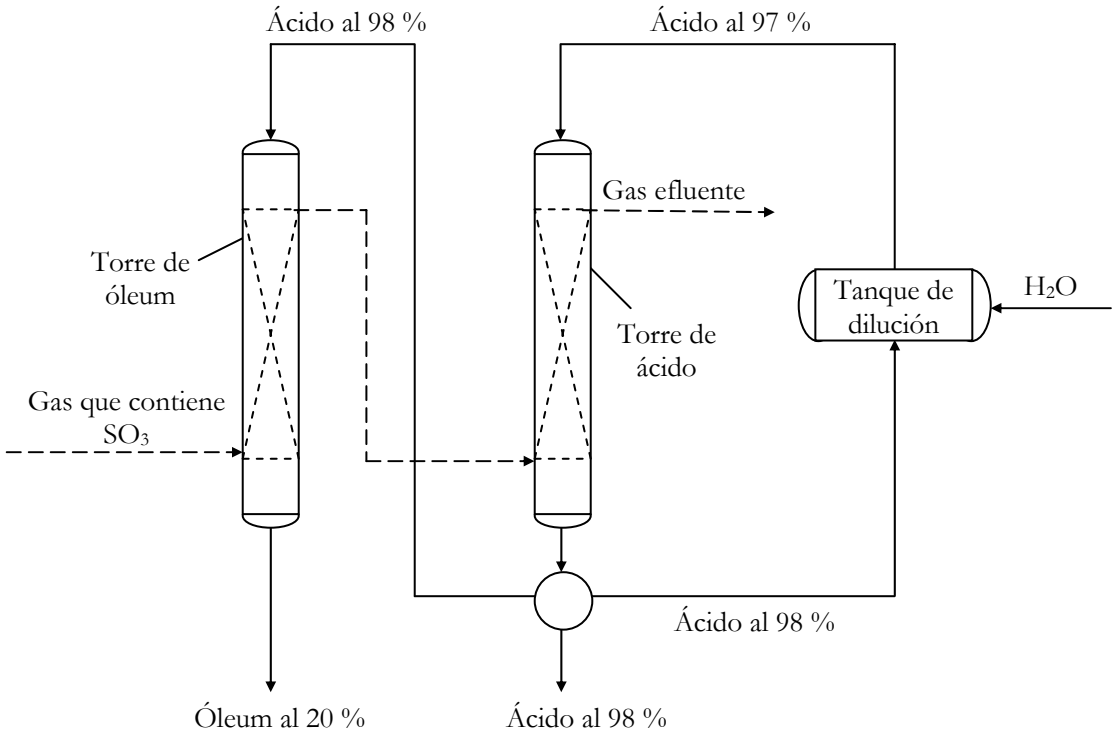
Una planta de contacto de ácido sulfúrico produce diariamente 10 toneladas de óleum de 20 % y 40 toneladas de ácido al 98%, como se muestra en la figura.

A la torre de óleum se alimenta una parte del ácido de la torre de 98%.

A la torre de 98 % se alimenta un ácido al 97 %, obtenido mediante la dilución de una parte de la descarga de 98 %.

El análisis del gas alimentado a la torre de óleum corresponde a 10.8 % de SO_3.

Calcule la cantidad de ácido que se deberá alimentar por día a cada torre.



SOLUCIÓN

La reacción que ocurre en la torre de óleum y en la torre de ácido es:

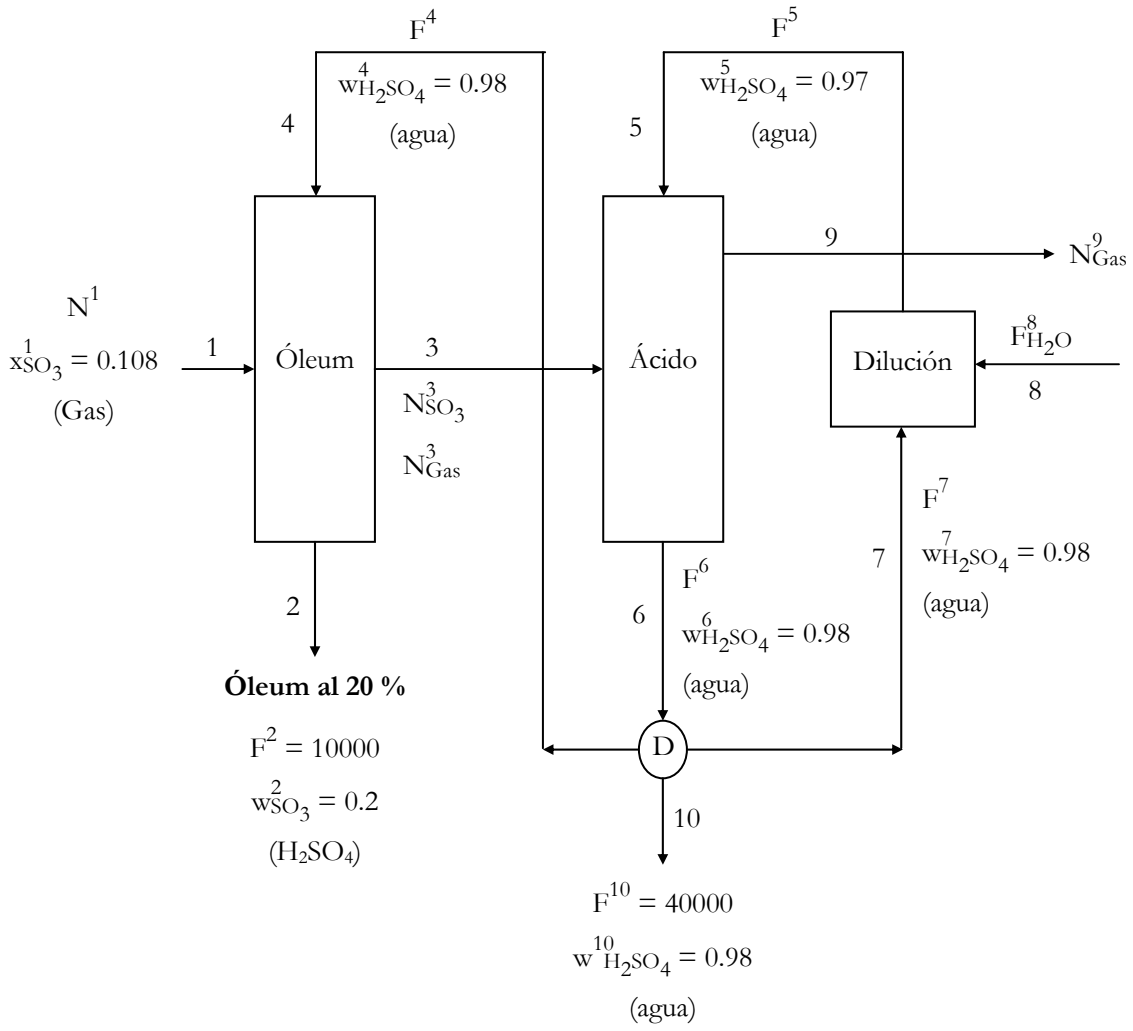
$$SO_3 + H_2O \xrightarrow{r_1} H_2SO_4$$

$$SO_3 + H_2O \xrightarrow{r_2} H_2SO_4$$

Relación:

R_D: Restricciones del divisor = (2 – 1) (3 – 1) = 2

Diagrama cuantitativo:



Suponiendo que el gas efluente no contiene SO_3, la Tabla de Grados de Libertad se muestra en la página siguiente.

Tabla de Grados de Libertad:

	Óleum	**Ácido**	**Dilución**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
NVI	8 + 1	7 + 1	5	8	18 + 2	8 + 1
NBMI	4	4	2	2	12	4
NFC	1	0	0	1	2	2
NCC	2 (+1)	1 (+1)	1 (+1)	1	4	3
NRC R_D	–	–	–	2	2	–
G de L	**1**	**2**	**1**	**2**	**0**	**0**

En el proceso Global ocurre una sola reacción cuya velocidad **r** debe ser la suma de las dos anteriores.

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Óleum: Incógnitas = 5 (N^1, $N^3_{SO_3}$, N^3_{Gas}, F^4, r_1)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 1

Ácido: Incógnitas = 6 ($N^3_{SO_3}$, N^3_{Gas}, F^5, F^6, N^9_{Gas}, r_2)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 2

Dilución: Incógnitas = 3 (F^5, F^7, $F^8_{H_2O}$)

Ecuaciones = 2 (balances)

G de L = 1

Divisor: Incógnitas = 6 (F^4, $w^4_{H_2SO_4}$, F^6, $w^6_{H_2SO_4}$, F^7, $w^7_{H_2SO_4}$)

Ecuaciones = 2 (balances) + 2 (R_D)

G de L = 2

Global: Incógnitas = 4 (r, N^1, $F^8_{H_2O}$, N^9_{Gas})

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 0

Tabla de Balances:

	Óleum	**Ácido**	**Dilución**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
SO_3	1	1	–	–	2	1
H_2SO_4	1	1	1	1	4	1
Gas	1	1	–	–	2	1
H_2O	1	1	1	1	4	1
Total	**4**	**4**	**2**	**2**	**12**	**4**

El proceso se encuentra correctamente especificado, y al valer cero sus grados de libertad, puede comenzarse con los balances en el proceso Global.

Estrategia de Solución:

1. Resolviendo balances Globales se conoce: N^1, $F^8_{H_2O}$, N^9_{Gas}, r.

2. Actualizando grados de libertad:
   Óleum: G de L A = 1 – 1 (N^1) = 0
   Ácido: G de L A = 2 – 1 (N^9_{Gas}) = 1
   Dilución: G de L A = 1 – 1 ($F^8_{H_2O}$) = 0

3. Resolviendo Torre de óleum se conoce F^4, $N^3_{SO_3}$, N^3_{Gas}, r_1, se agotan balances de SO_3 y gas.

4. Reconfirmando grados de libertad:
   Dilución: G de L A = 0 – 0 = 0

5. Resolviendo Dilución se conoce: F^{7}, F^{5}.

6. Actualizando grados de libertad:
   Ácido: G de L A = 1– 3 ($N^{3}_{SO_3}$, N^{3}_{Gas}, F^{5}) + 2 (balances agotados) = 0
   Divisor: G de L A = 2 – 2 (F^{4}, F^{7}) = 0

7. Se resuelve la Torre de Ácido y se comprueba en el Divisor.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

H_2SO_4: $0.98 \times 40000 + 0.8 \times 10000 = 98\ r$

$47200 = 98\ r$

r = 481.633

SO_3: $0.2 \times 10000 = 0.108\ N^{1} \times 80 - 80\ r$

$2000 = 8.64\ N^{1} - 80\ r$

N^{1} = 4691.043

H_2O: $0.02 \times 40000 = F^{8}_{H_2O} - 18 \times r$

$800 = F^{8}_{H_2O} - 18 \times 481.633$

$F^{8}_{H_2O}$ = 9469.388

Gas: $N^{9}_{Gas} = 0.892 \times 4691.0431$

N^{9}_{Gas} = 4184.411

Comprobando en el resumen del balance de materia:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
SO_3	506.633	40530.612
H_2O	—	9469.388
Total		**50000**

→ Global →

SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
SO_3	—	2000
H_2SO_4	481.633	47200
H_2O	—	800
Total		**50000**

Balance en la Torre de Óleum:

H_2SO_4: $\quad 8000 = 0.98\,F^4 + 98\,r_1 \qquad (1)$

H_2O: $\quad 0 = 0.02\,F^4 - 18\,r_1 \qquad (2)$

Resolviendo el sistema de dos ecuaciones:

$$\mathbf{r_1 = 8.1633} \qquad \mathbf{F^4 = 7346.9388}$$

Continuando con los balances:

SO_3: $\quad 80\,N^3_{SO_3} + 2000 = 80 \times 4691.0431 \times 0.108 - 80\,r_1$

$$80\,N^3_{SO_3} = 38530.6124 - 80 \times 8.1633$$

$$\mathbf{N^3_{SO_3} = 473.469}$$

Gas: $\quad N^3_{Gas} = 0.892 \times 4691.0431$

$$\mathbf{N^3_{Gas} = 4184.411}$$

Comprobando en el resumen del balance de materia:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
SO_3	506.633	40530.612
H_2SO_4	—	7200.000
H_2O	—	146.938
Total		**47877.55**

→ Óleum →

SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
SO_3	—	2000.00
SO_3	473.469	37877.52
H_2SO_4	—	8000.00
Total		**47877.52**

Balances en Dilución:

H_2SO_4: $0.97\ F^5 = 0.98\ F^7$ (1)

H_2O: $0.03\ F^5 = 0.02\ F^7 + 9469.388$ (2)

Resolviendo:

$$\mathbf{F^5 = 928000.024} \qquad \mathbf{F^7 = 918530.636}$$

Comprobando:

$$F^5 = F^7 + F^8_{H_2O}$$

$$928000.024 = 918530.636 + 9469.388$$

$$928000.024 = 928000.024$$

Balances en la Torre de Ácido:

H_2SO_4: $0.98\ F^6 = 0.97 \times 928000.024 + 98 \times r_2$ (1)

H_2O: $0.02\ F^6 = 0.03 \times 928000.024 - 18 \times r_2$ (2)

Resolviendo:

$$\mathbf{F^6 = 965877.55} \qquad \mathbf{r_2 = 473.469}$$

Comprobando en el resumen del balance de materia:

ENTRADA					SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**			**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
SO_3	473.469	37877.52	→	Ácido →	H_2SO_4	—	946560.00
H_2SO_4	—	900160.02			H_2O	—	19317.55
H_2O	—	27840.00					
Total		**965877.54**			**Total**		**965877.55**

Comprobando los resultados en el balance total del Divisor:

$$F^{6} = F^{7} + F^{10} + F^{4}$$

$$965877.55 \approx 918530.636 + 40000 + 7346.9388 = 965877.57$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Globales:

H_2SO_4: $0.98 \times 40000 + 0.8 \times 10000 = 98\ r$ (1)

SO_3: $0.2 \times 10000 = 0.108\ N^{1} \times 80 - 80\ r$ (2)

H_2O: $0.02 \times 40000 = F^{8}_{H_2O} - 18 \times r$ (3)

Gas: $N^{9}_{Gas} = 0.892 \times N^{1}$ (4)

Torre de Óleum:

H_2SO_4: $8000 = 0.98\ F^{4} + 98\ r_1$ (5)

H_2O: $0 = 0.02\ F^{4} - 18\ r_1$ (6)

SO_3: $80\ N^{3}_{SO_3} + 2000 = 80 \times N^{1} \times 0.108 - 80\ r_1$ (7)

Gas: $N^{3}_{Gas} = 0.892 \times N^{1}$ (8)

Dilución:

H_2SO_4: $0.97\ F^5 = 0.98\ F^7$ (9)

H_2O: $0.03\ F^5 = 0.02\ F^7 + F^8_{H_2O}$ (10)

Torre de Ácido:

H_2SO_4: $0.98\ F^6 = 0.97 \times F^5 + 98 \times r_2$ (11)

H_2O: $0.02\ F^6 = 0.03 \times F^5 - 18 \times r_2$ (12)

Los resultados son:

$F^4 = 7346.9388$
$F^5 = 928000$
$F^6 = 965877.5510$
$F^7 = 918530.6122$
$F^8_{H_2O} = 9469.3878$
$N^1 = 4691.0431$

$N^3_{Gas} = 4184.4104$
$N^3_{SO_3} = 473.4694$
$N^9_{Gas} = 4184.4104$
$r = 481.6327$
$r_1 = 8.1633$
$r_2 = 473.4694$

3.24. Los elementos clave del proceso Kraft son la recuperación de Na_2CO_3 y su conversión a NaOH. En el diagrama de flujo simplificado de la figura, se hace reaccionar Na_2CO_3 con $Ca(OH)_2$ en el calcinador, mediante la reacción

$$Na_2CO_3 + Ca(OH)_2 \longrightarrow 2\ NaOH + CaCO_3$$

El $CaCO_3$ se lava en un espesador y se convierte a CaO en un horno, según la reacción:

$$CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2$$

La cal viva resultante (CaO) se hidrata de nuevo para obtener $Ca(OH)_2$:

$$CaO + H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2$$

Use las composiciones que muestra el diagrama de flujo y las especificaciones adicionales:

$$F^5 = 4\ F^3 \qquad F^1_{H_2O} = F^{10}$$

y suponga que todas las reacciones tienen conversión del 100%.

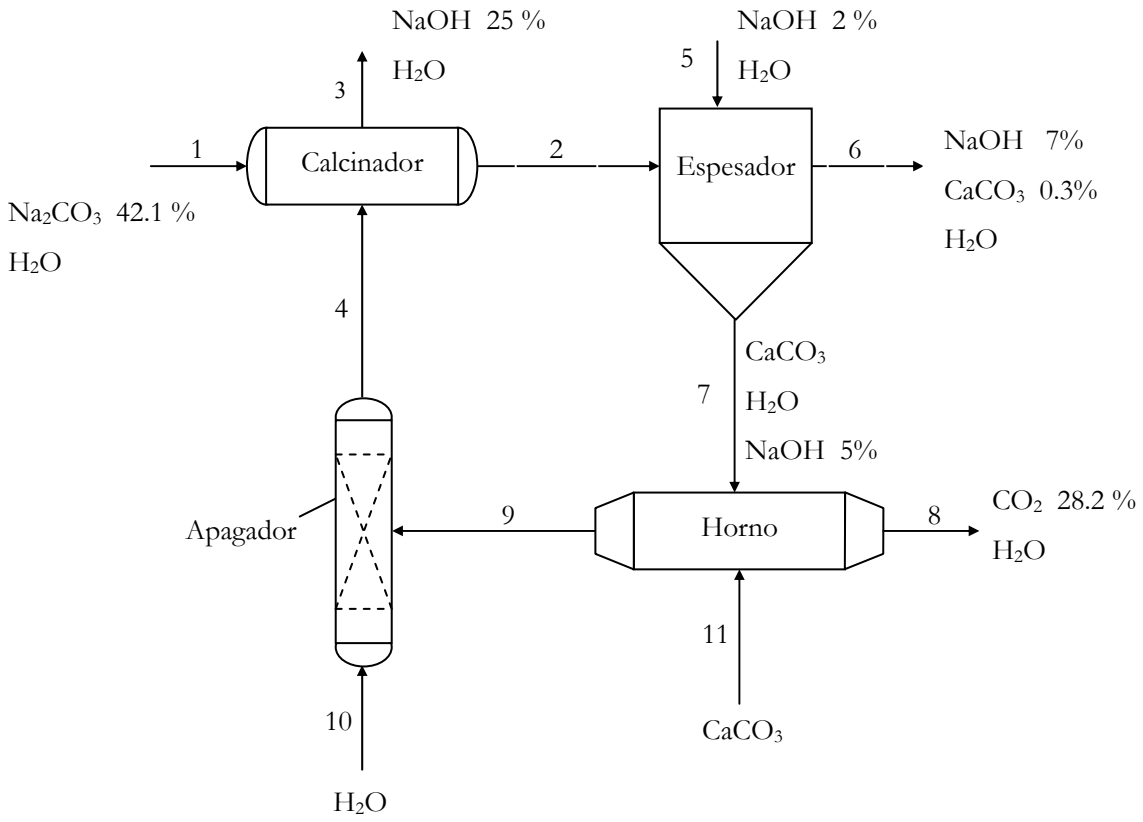
Todas las composiciones corresponden a porcentaje en masa.

a. Demuestre que las reacciones dadas son independientes.

b. Construya una tabla de grados de libertad.

c. Deduzca un orden de cálculo que pueda utilizarse para determinar todas las corrientes; presente detalladamente su razonamiento.

d. Resuelva los balances globales del problema para determinar las libras de $CaCO_3$ que se requieren por libra de Na_2CO_3 procesado.



SOLUCIÓN

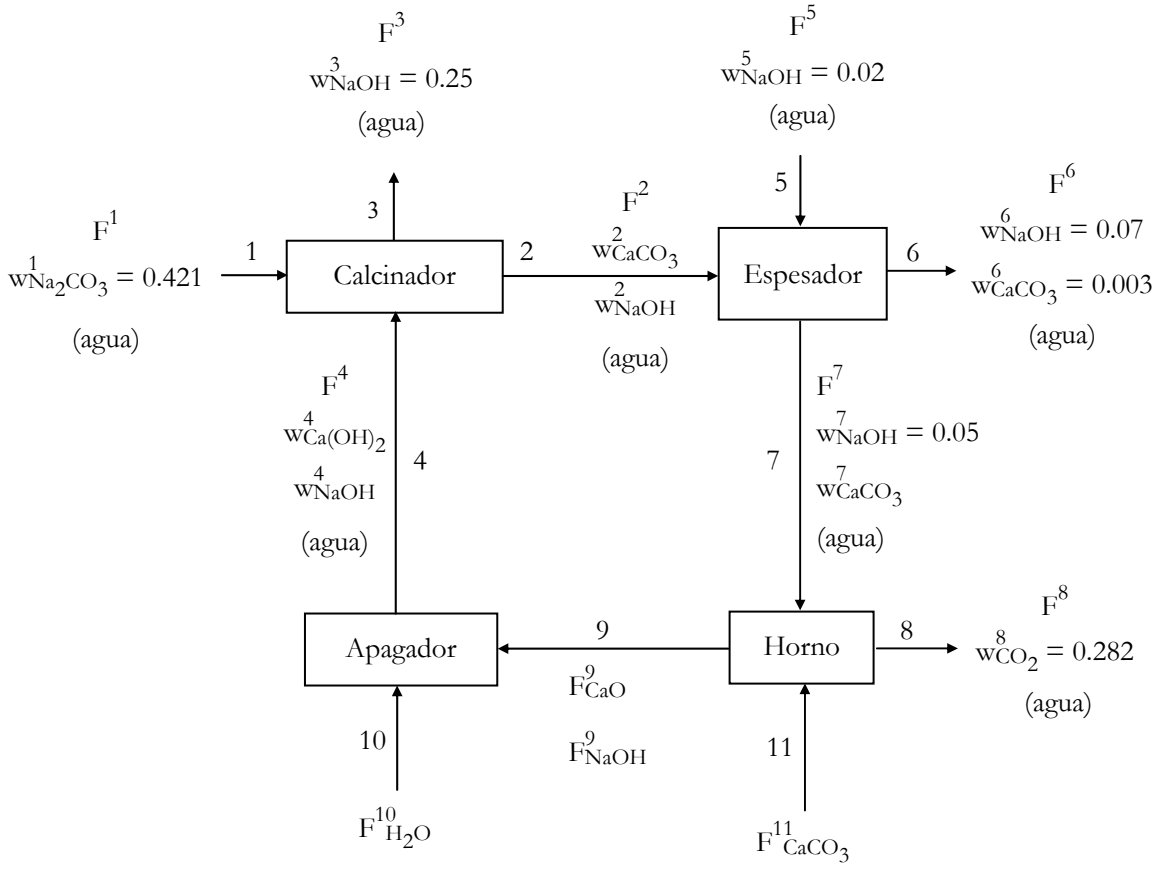
Las reacciones son:

$$Na_2CO_3 + Ca(OH)_2 \xrightarrow{r_1} 2\ NaOH + CaCO_3 \qquad \text{Calcinador}$$

$$CaCO_3 \xrightarrow{r_2} CaO + CO_2 \qquad \text{Horno}$$

$$CaO + H_2O \xrightarrow{r_3} Ca(OH)_2 \qquad \text{Apagador}$$

Diagrama cuantitativo:



a. Demuestre que las reacciones dadas son independientes.

A partir del arreglo estequiométrico puede verse fácilmente que las tres reacciones son independientes:

	1a. Reacción	2a. Reacción	3a. Reacción
Na_2CO_3	– 1	0	0
$Ca(OH)_2$	– 1	0	1
NaOH	2	0	0
$CaCO_3$	1	– 1	0
CaO	0	1	– 1
CO_2	0	1	0
H_2O	0	0	– 1

b. Construya una tabla de grados de libertad.

Relaciones:

R_1: $F^5 = 4\,F^3$

R_2: $0.579\,F^1 = F^{10}_{H_2O}$

Tabla de Grados de Libertad:

	Calcinador	Espesador	Horno	Apagador	Proceso	Global
NVI	10 + 1	11	8 + 1	6 + 1	24 + 3	13 + 3
NBMI	5	3	5	4	17	7
NFC	0	0	0	0	0	0
NCC	2	4	2	0	7	6
NRC R_1	–	–	–	–	1	1
R_2	–	–	–	–	1	1
G de L	**4**	**4**	**2**	**3**	**1**	**1**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Calcinador: Incógnitas = 9 (F^1, F^2, $w^2_{CaCO_3}$, w^2_{NaOH}, F^3, F^4, $w^4_{Ca(OH)_2}$, w^4_{NaOH}, r_1)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 4

Espesador: Incógnitas = 7 (F^2, $w^2_{CaCO_3}$, w^2_{NaOH}, F^5, F^6, F^7, $w^7_{CaCO_3}$)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 4

Horno: Incógnitas = 7 (F^7, $w^7_{CaCO_3}$, F^8, F^9_{CaO}, F^9_{NaOH}, F^{11}, r_2)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 2

Apagador: Incógnitas = 7 (F^{9}_{CaO}, F^{9}_{NaOH}, $F^{10}_{H_2O}$, F^{4}, $w^{4}_{Ca(OH)_2}$, w^{4}_{NaOH}, r_3)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 3

Global: Incógnitas = 10 (F^{1}, F^{3}, F^{5}, F^{6}, F^{8}, $F^{10}_{H_2O}$, $F^{11}_{CaCO_3}$, r_1, r_2, r_3)

Ecuaciones = 7 (balances) + 2 (R_1, R_2)

G de L = 1

Tabla de Balances:

	Calcinador	**Espesador**	**Horno**	**Apagador**	**Proceso**	**Global**
Na_2CO_3	1	–	–	–	1	1
$Ca(OH)_2$	1	–	–	1	2	1
NaOH	1	1	1	1	4	1
$CaCO_3$	1	1	1	–	3	1
CaO	–	–	1	1	2	1
CO_2	–	–	1	–	1	1
H_2O	1	1	1	1	4	1
Total	**5**	**3**	**5**	**4**	**17**	**7**

c. Deduzca un orden de cálculo que pueda utilizarse para determinar todas las corrientes; presente detalladamente su razonamiento.

Estrategia de Solución:

1. Tomando base de cálculo en Global y resolviendo, se conocen: F^{1}, F^{3}, F^{5}, F^{6}, F^{8}, $F^{11}_{CaCO_3}$, $F^{10}_{H_2O}$, r_1, r_2, r_3. Se agotan R_1 y R_2 y se agotan los balances de Na_2CO_3 y de CO_2.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Apagador: G de L A = 3 – 1 ($F^{10}_{H_2O}$) – 1 (r_3) = 1
   Espesador: G de L A = 4 – 2 (F^{5}, F^{6}) = 2
   Calcinador: G de L A = 4 – 2 (F^{1}, F^{3}) – 1 (r_1) + 1 (balance agotado: Na_2CO_3) = 2
   Horno: G de L A = 2 – 2 (F^{8}, $F^{11}_{CaCO_3}$) – 1 (r_2) + 1 (balance agotado: CO_2) = 0

3. Resolviendo Horno, se conocen: F^{7}, $w^{7}_{CaCO_3}$, F^{9}_{CaO}, F^{9}_{NaOH}, se agotan balances de CaO.

4. Actualizando Grados de Libertad:
   Espesador: G de L A = $2 - 1\ (F^{7}) - 1\ (w^{7}_{CaCO_3}) = 0$
   Apagador: G de L A = $1 - 2\ (F^{9}_{CaO}, F^{9}_{NaOH}) + 1$ (balance agotado: CaO) = 0

5. Resolviendo Apagador se conoce: F^{4}, $w^{4}_{Ca(OH)_2}$, w^{4}_{NaOH}, se agotan balances de $Ca(OH)_2$.

6. Reconfirmando Grados de Libertad:
   Espesador: G de L A = 0 – 0 = 0

7. Se resuelve el Espesador y se comprueba en Calcinador.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

Base de cálculo: $\mathbf{F^{1} = 10000}$

De R_2: $0.579\ F^{1} = F^{10}_{H_2O}$

$$0.579 \times 10000 = F^{10}_{H_2O}$$

$$\mathbf{F^{10}_{H_2O} = 5790}$$

Na_2CO_3: $0 = 0.421 \times 10000 - 106\ r_1$

$$\mathbf{r_1 = 39.717}$$

$Ca(OH)_2$: $0 = -39.717 + r_3$

$$\mathbf{r_3 = 39.717}$$

CaO: $0 = r_2 - 39.717$

$$\mathbf{r_2 = 39.717}$$

CO_2: $0.282\ F^{8} = 44 \times 39.717$

$$\mathbf{F^{8} = 6196.979}$$

$$CaCO_3: \quad 0.003\,F^{6} = F^{11}_{CaCO_3} + 100 \times 39.717 - 100 \times 39.717$$

$$0.003\,F^{6} = F^{11}_{CaCO_3} \qquad (1)$$

De R_1:
$$F^{5} = 4\,F^{3} \qquad (2)$$

NaOH:
$$0.25\,F^{3} + 0.07\,F^{6} = 0.02\,F^{5} + 2 \times 40\,r_1 \qquad (3)$$

Total:
$$F^{3} + F^{6} + 6196.979 = 10000 + F^{5} + F^{11}_{CaCO_3} + 5790 \qquad (4)$$

Resolviendo el sistema de 4 ecuaciones con 4 incógnitas, se encuentra que:

$F^{3} = 6578.082$ **$F^{5} = 26312.328$**

$F^{6} = 29415.514$ **$F^{11}_{CaCO_3} = 88.247$**

Comprobando en el resumen del balance de materia:

ENTRADA				SALIDA	
Sustancia	**Masa**			**Sustancia**	**Masa**
Na_2CO_3	4210.000			NaOH	3703.607
NaOH	526.247	→	Global →	$CaCO_3$	88.247
$CaCO_3$	88.247	→		CO_2	1747.548
H_2O	37366.081			H_2O	36651.174
Total	**42190.575**			**Total**	**42190.576**

Balances en el Horno:

CaO:
$$F^{9}_{CaO} = 0 + 56 \times 39.717$$

$F^{9}_{CaO} = 2224.152$

$CaCO_3$: $$0 = 88.247 + w^7_{CaCO_3} F^7 - 100\ r_2$$

$$w^7_{CaCO_3} F^7 = 3883.453 \qquad (1)$$

H_2O: $$(1 - 0.282)\ F^8 = (1 - w^7_{CaCO_3} - 0.05)\ F^7$$

$$4449.431 = (0.95 - w^7_{CaCO_3})\ F^7 \qquad (2)$$

Resolviendo el sistema de 2 ecuaciones y 2 incógnitas:

$$\mathbf{F^7 = 8771.457} \qquad \mathbf{w^7_{CaCO_3} = 0.4427}$$

NaOH: $$F^9_{NaOH} = 0.05 \times 8771.457$$

$$F^9_{NaOH} = 438.573$$

Comprobando en el resumen del balance de materia:

ENTRADA				**SALIDA**	
Sustancia	**Masa**			**Sustancia**	**Masa**
				NaOH	438.573
$CaCO_3$	3971.700				
NaOH	438.573	→	Horno	→ CaO	2224.152
H_2O	4449.760			→ H_2O	4449.694
				CO_2	1747.548
Total	**8860.033**			**Total**	**8859.967**

Balances en el Apagador:

Total: $$F^9_{CaO} + F^9_{NaOH} + F^{10}_{H_2O} = F^4$$

$$F^4 = 2224.152 + 438.573 + 5790$$

$$\mathbf{F^4 = 8452.725}$$

$Ca(OH)_2$: $w^4_{Ca(OH)_2} \times 8452.725 = 0 + 74.1 \times 39.717$

$$\mathbf{w^4_{Ca(OH)_2} = 0.3482}$$

NaOH: $w^4_{NaOH} \times 8452.725 = 438.573$

$$\mathbf{w^4_{NaOH} = 0.0519}$$

Comprobando en el resumen del balance de materia:

ENTRADA				SALIDA	
Sustancia	**Masa**			**Sustancia**	**Masa**
NaOH	438.573	→	Apagador	→ $Ca(OH)_2$	2945.815
H_2O	5790.000			NaOH	438.573
CaO	2224.152			H_2O	5067.629
Total	**8452.725**			**Total**	**8452.017**

Balances en el Espesador:

Total: $F^2 + F^5 = F^6 + F^7$

$$F^2 = 29415.514 + 8771.457 - 26312.328$$

$$\mathbf{F^2 = 11874.6431}$$

NaOH: $0.07\ F^6 + 0.05\ F^7 = 0.02\ F^5 + w^2_{NaOH}\ F^2$

$$0.07 \times 29415.514 + 0.05 \times 8771.457 = 0.02 \times 26312.328 + w^2_{NaOH}\ F^2$$

$$1971.41227 = w^2_{NaOH} \times 11874.6431$$

$$\mathbf{w^2_{NaOH} = 0.1660}$$

$CaCO_3$: $w^{7}_{CaCO_3} F^{7} + 0.003 F^{6} = w^{2}_{CaCO_3} F^{2}$

$3883.124 + 88.247 = w^{2}_{CaCO_3} \times 11874.6431$

$$\mathbf{w^{2}_{CaCO_3} = 0.3344}$$

Comprobando en el resumen del balance de materia del Calcinador:

ENTRADA			SALIDA	
Sustancia	**Masa**		**Sustancia**	**Masa**
Na_2CO_3	4210.000			
$Ca(OH)_2$	2945.815	→	NaOH	3615.933
NaOH	438.573	→	$CaCO_3$	3971.371
H_2O	10860.710		H_2O	10867.731
Total	**18455.098**		**Total**	**18455.035**

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Globales:

Base de cálculo: $\mathbf{F^{1} = 10000}$

De R_1: $F^{5} = 4 F^{3}$ (1)

De R_2: $0.579 F^{1} = F^{10}_{H_2O}$ (2)

Na_2CO_3: $0 = 0.421 \times F^{1} - 106\, r_1$ (3)

$Ca(OH)_2$: $0 = -r_1 + r_3$ (4)

CaO: $0 = r_2 - r_3$ (5)

CO_2: $0.282 F^{8} = 44 \times r_2$ (6)

Total: $F^{3} + F^{6} + F^{8} = F^{1} + F^{5} + F^{11}_{CaCO_3} + F^{10}_{H_2O}$ (7)

$CaCO_3$: $0.003 F^{6} = F^{11}_{CaCO_3} + 100 \times r_1 - 100 \times r_2$ (8)

NaOH: $0.25 F^{3} + 0.07 F^{6} = 0.02 F^{5} + 2 \times 40\, r_1$ (9)

Horno:

$$\text{CaO:} \quad F_{CaO}^{9} = 0 + 56 \times r_2 \tag{10}$$

$$\text{CaCO}_3\text{:} \quad 0 = F_{CaCO_3}^{11} + w_{CaCO_3}^{7} F^{7} - 100\, r_2 \tag{11}$$

$$\text{H}_2\text{O:} \quad (1 - 0.282)\, F^{8} = (1 - w_{CaCO_3}^{7} - 0.05)\, F^{7} \tag{12}$$

$$\text{NaOH:} \quad F_{NaOH}^{9} = 0.05 \times F^{7} \tag{13}$$

Apagador:

$$\text{Total:} \quad F_{CaO}^{9} + F_{NaOH}^{9} + F_{H_2O}^{10} = F^{4} \tag{14}$$

$$\text{Ca(OH)}_2\text{:} \quad w_{Ca(OH)_2}^{4} \times F^{4} = 0 + 74.1 \times r_3 \tag{15}$$

$$\text{NaOH:} \quad w_{NaOH}^{4} \times F^{4} = F_{NaOH}^{9} \tag{16}$$

Espesador:

$$\text{Total:} \quad F^{2} + F^{5} = F^{6} + F^{7} \tag{17}$$

$$\text{NaOH:} \quad 0.07\, F^{6} + 0.05\, F^{7} = 0.02\, F^{5} + w_{NaOH}^{2} F^{2} \tag{18}$$

$$\text{CaCO}_3\text{:} \quad w_{CaCO_3}^{7} F^{7} + 0.003\, F^{6} = w_{CaCO_3}^{2} F^{2} \tag{19}$$

Resolviendo el sistema de 19 ecuaciones con 19 incógnitas, tenemos:

$F_{H_2O}^{10} = 5790$
$F_{CaCO_3}^{11} = 88.24651$
$F^{2} = 11874.64585$
$F^{3} = 6578.07774$
$F^{4} = 8452.72359$
$F^{5} = 26312.31094$
$F^{6} = 29415.50394$
$F^{7} = 8771.45285$
$F^{8} = 6196.97578$

$F_{CaO}^{9} = 2224.15094$
$F_{NaOH}^{9} = 438.57264$
$r_1 = 39.71698$
$r_2 = 39.71698$
$r_3 = 39.71698$
$w_{CaCO_3}^{2} = 0.33447$
$w_{NaOH}^{2} = 0.16602$
$w_{Ca(OH)_2}^{4} = 0.34818$
$w_{NaOH}^{4} = 0.05188$
$w_{CaCO_3}^{7} = 0.44274$

d. Resuelva los balances globales del problema para determinar las libras de $CaCO_3$ que se requieren por libra de Na_2CO_3 procesado.

$$\frac{F^{11}_{CaCO_3}}{F^{1}_{Na_2CO_3}} = \frac{88.24651}{4210} = 0.02096$$

3.25. El producto P se forma a partir del reactivo R, de acuerdo con la reacción:

$$2\ R \xrightarrow{r_1} P + W$$

Desafortunadamente, tanto el reactivo como el producto P se descomponen y forman el subproducto B según las reacciones:

$$R \xrightarrow{r_2} B + W$$

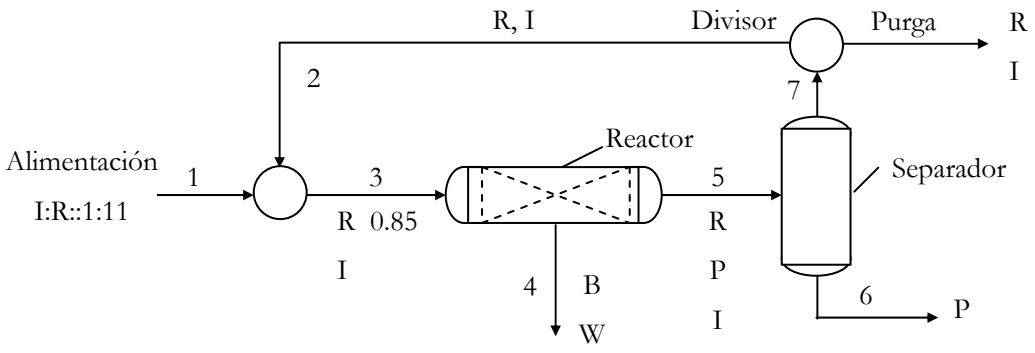
$$P \xrightarrow{r_3} 2\ B + W$$

Cuando se utiliza una alimentación al proceso que contiene una parte del inerte I por 11 parte de R, y se ajusta la razón de recirculación para obtener una fracción mol de R de 0.85 en la alimentación al reactor, se observa una conversión de 50 % de R en la planta, y un rendimiento de 80 % de P a partir de R.

a. Construya una tabla de grados de libertad para el proceso mostrado en la figura. ¿Está especificado correctamente el proceso?
b. Suponga que, gracias al uso de un nuevo catalizador, únicamente se presentan las dos primeras reacciones. ¿Cómo afecta esto al análisis de grados de libertad de la parte a?

c. Usando la tabla de grados de libertad para las condiciones correspondientes a la parte b, deduzca un orden de cálculo que pueda utilizarse para determinar todas las corrientes.

d. Resuelva el problema.



SOLUCIÓN

Relaciones:

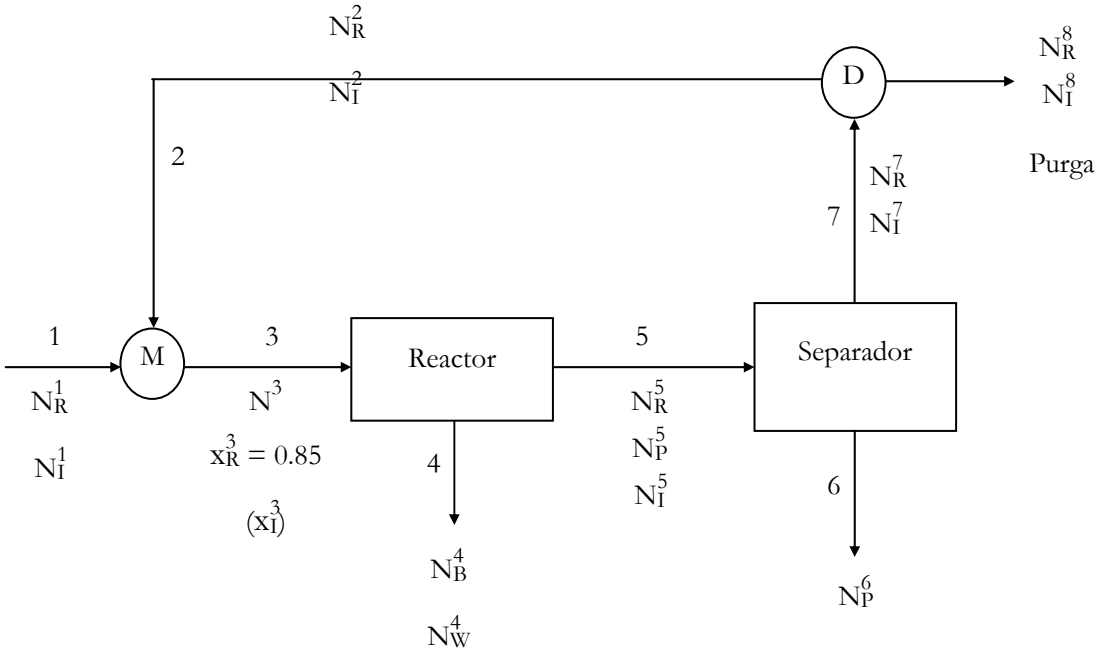
R_1: $\dfrac{N_I^1}{N_R^1} = \dfrac{1}{11}$

R_2: Conversión de 50% de R: $x_R^8 N^8 = 0.5\, N_R^1$

R_3: Rendimiento de P a partir de R = 80 %

R_4: Restricciones del divisor = (2 – 1) (2 – 1) = 1

Diagrama cuantitativo:



a. Construya una tabla de grados de libertad para el proceso mostrado en la figura. ¿Está especificado correctamente el proceso?

	Mezclador	**Reactor**	**Separador**	**Divisor**	**Proceso**	Global
NVI	6	7 + 3	6	6	16 + 3	7 + 3
NBMI	2	5	3	2	12	5
NFC	0	0	0	0	0	0
NCC	1	1	0	0	1	0
NRC R_1	1	–	–	–	1	1
R_2	–	–	–	–	1	1
R_3	–	–	–	–	1	1
R_4	–	–	–	1	1	–
G de L	**2**	**4**	**3**	**3**	**2**	**2**

A partir de la anterior tabla de grados de libertad, claramente se ve que el proceso está sub-especificado.

b. Suponga que, gracias al uso de un nuevo catalizador, únicamente se presentan las dos primeras reacciones. ¿Cómo afecta esto al análisis de grados de libertad de la parte a?.

Lógicamente tendrá que haber un cambio en el número de variables del proceso:

	Mezclador	**Reactor**	**Separador**	**Divisor**	**Proceso**	Global
NVI	6	7 + 2	6	6	16 + 2	7 + 2
NBMI	2	5	3	2	12	5
NFC	0	0	0	0	0	0
NCC	1	1	0	0	1	0
NRC R_1	1	–	–	–	1	1
R_2	–	–	–	–	1	1
R_3	–	–	–	–	1	1
R_4	–	–	–	1	1	–
G de L	**2**	**4**	**3**	**3**	**1**	**1**

Con estas condiciones, el proceso queda correctamente especificado.

c. Usando la tabla de grados de libertad para las condiciones correspondientes a la parte b, deduzca un orden de cálculo que pueda utilizarse para determinar todas las corrientes.

Tabla de Balances:

	Mezclador	Reactor	Separador	Divisor	Proceso	Global
R	1	1	1	1	4	1
P	–	1	1	–	2	1
W	–	1	–	–	1	1
B	–	1	–	–	1	1
I	1	1	1	1	4	1
Total	**2**	**5**	**3**	**2**	**12**	**5**

Estrategia de Solución:

1. Tomando base de cálculo en Global y resolviendo se conoce N_R^1, N_I^1, N_B^4, N_W^4, N_P^6, N^8, x_R^8, r_1, r_2 y por arrastre (x_R^7, x_R^2). Se agotan balances de W y B, además las relaciones R_1, R_2, R_3.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Mezclador: G de L A = $2 - 2\ (N_R^1, N_I^1) - 1\ (x_R^2) + 1$ (R_1 agotada) $= 0$
   Separador: G de L A = $3 - 1\ (N_P^6) - 1\ (x_P^7) = 1$
   Divisor: G de L A = $3 - 1\ (N^8) - 1\ (x_R^8) = 1$
   Reactor: G de L A = $3 - 2\ (N_B^4, N_W^4) - 2\ (r_1, r_2) + 2$ (balances agotados:B,W) $= 1$

3. Resolviendo el Mezclador se conoce N^2, N^3.

4. Actualizando grados de libertad:
   Divisor: G de L A = $1 - 1\ (N^2) = 0$
   Reactor: G de L A = $1 - 1\ (N^3) = 0$

5. Resolviendo el Reactor se conoce N_R^5, N_P^5, N_I^5. Se agota el balance de P.

6. Reconfirmando grados de libertad:
   Divisor: G de L A = $0 - 0 = 0$

7. Se resuelve el Divisor y se comprueba en el Separador.

d. Resuelva el problema.

Las reacciones son:

$$2\ R \xrightarrow{r_1} P + W$$

$$R \xrightarrow{r_2} B + W$$

Balances Globales:

Base de cálculo: $\mathbf{N_R^1 = 1100}$

De la relación R_1: $$\frac{N_I^1}{N_R^1} = \frac{1}{11}$$

$$\mathbf{N_I^1 = 100}$$

De R_2: $$x_R^8 N^8 = 0.5\, N_R^1 \qquad (1)$$

De R_3: $$\frac{N_P^6}{N_R^1 - x_R^8 N^8} = \frac{1}{2} \times 0.8 \qquad (2)$$

Balance de R: $$x_R^8 N^8 = 1100 - 2\, r_1 - r_2 \qquad (3)$$

Balance de P: $$N_P^6 = r_1 \qquad (4)$$

Balance de W: $$N_W^4 = r_1 + r_2 \qquad (5)$$

Balance de B: $$N_B^4 = r_2 \qquad (6)$$

Balance de I: $$(1 - x_R^8)\, N^8 = 100 \qquad (7)$$

Resolviendo el sistema de 7 ecuaciones con 7 incógnitas obtenemos los siguientes resultados:

$\mathbf{N_W^4 = 330}$ $\mathbf{r_1 = 220}$ $\mathbf{N_P^6 = 220}$

$\mathbf{r_2 = 110}$ $\mathbf{N_B^4 = 110}$ $\mathbf{N^8 = 650}$

$$\mathbf{x_R^8 = x_R^7 = x_R^2 = 0.8462}$$

Balances en el Mezclador:

Balance de R: $1100 + 0.8462\,N^{2} = 0.85\,N^{3}$ (1)

Balance de I: $100 + (1 - 0.8462)\,N^{2} = (1 - 0.85)\,N^{3}$ (2)

Resolviendo las ecuaciones, tenemos:

$$\mathbf{N^{2} = 21052.6316} \qquad \mathbf{N^{3} = 22252.6316}$$

Resumen del balance de materia:

ENTRADA	
Sustancia	**Moles**
R	18914.7369
I	3337.8947
Total	**22252.6316**

SALIDA	
Sustancia	**Moles**
R	18914.2000
I	3337.8947
Total	**22252.0947**

Balances en el Reactor:

Balance de R: $N_R^5 = 0.85 \times 22252.6316 - 2 \times 220 - 110$

$$\mathbf{N_R^5 = 18364.7369}$$

Balance de P: $\mathbf{N_P^5 = 220}$

Balance de I: $N_I^5 = (1 - 0.85) \times 22252.6316$

$$\mathbf{N_I^5 = 3337.8947}$$

Balances en el Divisor:

Total: $N^{7} = 650 + 21052.6316 = 21702.6316$

Resumen del balance de materia:

ENTRADA	
Sustancia	**Moles**
R	18364.7669
I	3337.8947
Total	**21702.6616**

SALIDA	
Sustancia	**Moles**
R	18364.7669
I	3337.8947
Total	**21702.6616**

Finalmente se comprueba en balance total del Separador:

ENTRADA	
Sustancia	**Moles**
R	18364.7669
I	3337.8947
P	220.0000
Total	**21922.6616**

SALIDA	
Sustancia	**Moles**
R	18364.7669
I	3337.8947
P	220.0000
Total	**21922.6616**

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Globales:

Base de cálculo: $\mathbf{N_R^1 = 1100}$

De R_1: $$\frac{N_I^1}{N_R^1} = \frac{1}{11} \quad (1)$$

De R_2: $$x_R^8 N^8 = 0.5\, N_R^1 \quad (2)$$

Balance de R: $$x_R^8 N^8 = N_R^1 - 2\, r_1 - r_2 \quad (3)$$

De R_3: $$\frac{N_P^6}{N_R^1 - x_R^8 N^8} = \frac{1}{2} \times 0.8 \quad (4)$$

Balance P: $$N_P^6 = r_1 \quad (5)$$

Balance de W: $$N_W^4 = r_1 + r_2 \quad (6)$$

Balance de B: $$N_B^4 = r_2 \quad (7)$$

Balance de I: $(1 - x_R^8)\, N^8 = N_I^1$ (8)

De la Restricción: $x_R^8 = x_R^2$ (9)

Mezclador:

Balance de R: $N_R^1 + x_R^2 N^2 = 0.85\, N^3$ (10)

Balance de I: $N_I^1 + (1 - x_R^2)\, N^2 = (1 - 0.85)\, N^3$ (11)

Reactor:

Balance de R: $N_R^5 = 0.85 \times N^3 - 2 \times r_1 - r_2$ (12)

Balance de P: $N_P^5 = r_1$ (13)

Balance de I: $N_I^5 = (1 - 0.85) \times N^3$ (14)

Divisor:

Total: $N^7 = N^2 + N^8$ (15)

Resolviendo el sistema de 15 ecuaciones y 15 incógnitas, tenemos:

$N_I^1 = 100$
$N^2 = 20800$
$N^3 = 22000$
$N_B^4 = 110$
$N_W^4 = 330$
$N_I^5 = 3300$
$N_P^5 = 220$
$N_R^5 = 18150$
$N_P^6 = 220$
$N^7 = 21450$
$N^8 = 650$
$r_1 = 220$
$r_2 = 110$
$x_R^2 = 0.8461538$
$x_R^8 = 0.8461538$

3.26. El ácido sulfúrico se produce mediante la oxidación sucesiva de azufre hasta SO_3, seguida de reacción con H_2O.

En el diagrama de flujo mostrado en la figura de la siguiente página, primero se hacen reaccionar el azufre y el aire en el quemador de azufre, para producir SO_2 según la reacción:

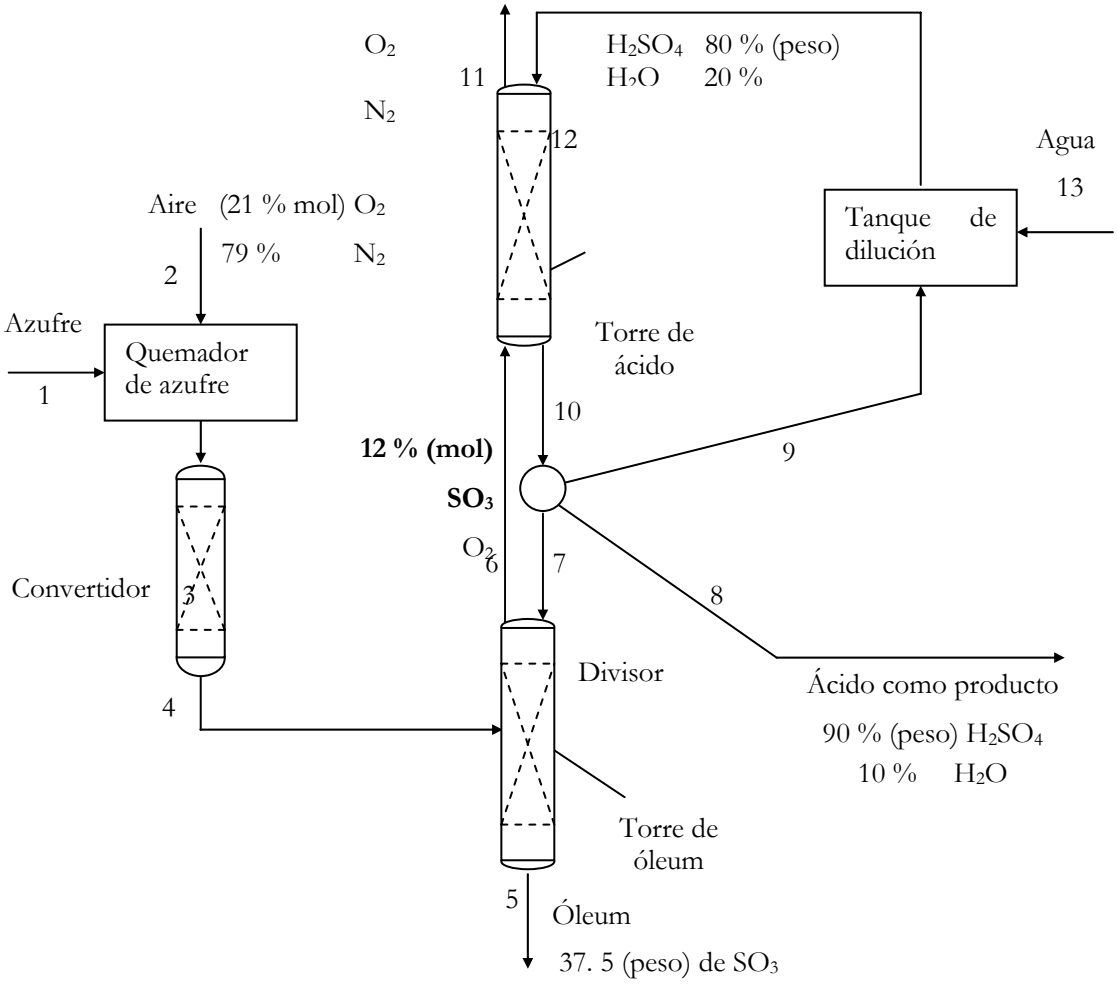
$$S + O_2 \longrightarrow SO_2$$

En esta reacción, todo el azufre se convierte a SO_2.

Suponga que el aire es 21 % molar de oxígeno y 79% de N_2, y que se utiliza 50 % más de oxígeno que la cantidad estequiométrica necesaria para convertir el azufre a SO_2.

La corriente gaseosa que sale del quemador se envía al convertidor, en donde todo el SO_2 se oxida hasta SO_3 con ayuda de un catalizador.

A continuación, se pone en contacto en la torre de óleum la corriente gaseosa que contiene SO_3 con una corriente de H_2SO_4 concentrado.



El SO_3 reacciona con el agua presente en la corriente de ácido, mediante la reacción:

$$H_2O + SO_3 \longrightarrow H_2SO_4$$

Además, algo del SO_3 se disuelve en el H_2SO_4 puro para obtener un producto (óleum) que contiene 37.5% de SO_3 y el resto H_2SO_4.

Enseguida la corriente gaseosa a la salida de la torre de óleum, que contiene 12 % mol de SO_3, se pone en contacto con una corriente de ácido más diluida (80 % de H_2SO_4 y el resto H_2O), en la torre de ácido.

En esta unidad, todo el SO_3 restante reacciona hasta H_2SO_4.

El ácido diluido se prepara recirculando algo de ácido concentrado y mezclándolo con agua en el tanque de dilución.

Calcule todos los flujos en el proceso, suponiendo que la planta va a producir 20000 lb/día de producto (H_2SO_4 al 90%).

SOLUCIÓN

Las reacciones son:

Quemador:	$S + O_2 \longrightarrow$	SO_2	r_1
Convertidor:	$SO_2 + {}^1/_2\ O_2 \longrightarrow$	SO_3	r_2
Torre de óleum:	$SO_3 + H_2O \longrightarrow$	H_2SO_4	r_3'
Torre de ácido:	$SO_3 + H_2O \longrightarrow$	H_2SO_4	r_3"

Relaciones:

R_1: $N^2_{O_2}$ se suministra en un 50% en exceso del necesario para pasar todo el S a SO_2.

R_2: Restricciones del divisor = $R_D = (3 - 1)(2 - 1) = 2$

Diagrama cuantitativo:

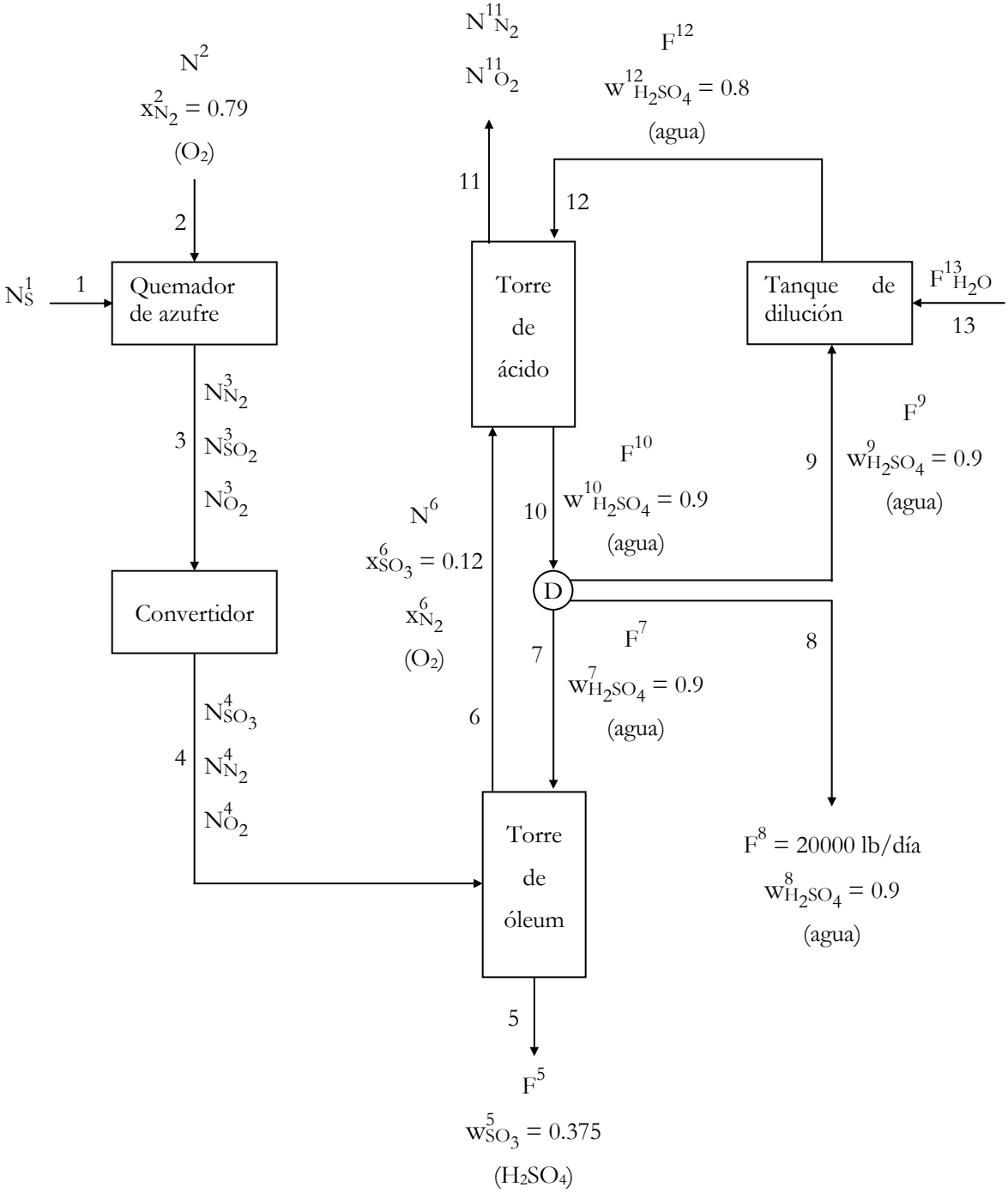


Tabla de Grados de Libertad:

	Quemador	Convertidor	Torre de Óleum	Divisor
NVI	6 + 1	6 + 1	10 + 1	8
NBMI	4	4	5	2
NFC	0	0	0	1
NCC	1	0	2 (+ 1)	1
NRC R_1	1	0	0	0
R_2	0	0	0	2
G de L	**1**	**3**	**3**	**2**
G de L*	**1**	**3**	**3**	**3**

	Torre de Ácido	Tanque de dilución	Proceso	Global
NVI	9 + 1	5	27 + 4	10 + 3
NBMI	5	2	22	7
NFC	0	0	1	1
NCC	2 (+ 1)	1 (+ 1)	5	3
NRC R_1	0	0	1	1
R_2	0	0	2	0
G de L	**2**	**1**	**0**	**1**
G de L*	**2**	**1**	**1**	**2**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Quemador:

Incógnitas = 6 (N^{2}, N_S^{1}, $N_{O_2}^{3}$, $N_{N_2}^{3}$, $N_{SO_2}^{3}$, r_1)

Ecuaciones = 4 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 1

Convertidor:

Incógnitas = 7 ($N_{O_2}^{3}$, $N_{N_2}^{3}$, $N_{SO_2}^{3}$, $N_{O_2}^{4}$, $N_{SO_3}^{4}$, $N_{N_2}^{4}$, r_2)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 3

Torre de óleum:

Incógnitas = 8 ($N_{O_2}^{4}$, $N_{SO_3}^{4}$, $N_{N_2}^{4}$, F^{5}, F^{7}, N^{6}, $x_{N_2}^{6}$, r_3')

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 3

Torre de ácido: Incógnitas = 7 ($N^{11}_{O_2}$, $N^{11}_{N_2}$, F^{10}, F^{12} N^{6}, $x^{6}_{N_2}$, r_3")

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 2

Divisor: Incógnitas = 7 (F^{7}, $w^{7}_{H_2SO_4}$, F^{8}, F^{9}, $w^{9}_{H_2SO_4}$, F^{10}, $w^{10}_{H_2SO_4}$)

Ecuaciones = 2 (balances)+ 2 (R_2)

G de L = 3

Tanque: Incógnitas = 3 (F^{9}, F^{12}, $F^{13}_{H_2O}$)

Ecuaciones = 2 (balances)

G de L = 1

Global: Incógnitas = 10 (N^{1}_{S}, N^{2}, F^{5}, F^{8}, $N^{11}_{O_2}$, $N^{11}_{N_2}$, $F^{12}_{H_2O}$, r_1, r_2, r_3)

Ecuaciones = 7 (balances)+ 1 (R_1)

G de L = 2

Tabla de Balances:

	Quemador	**Convertidor**	**Torre de Óleum**	**Divisor**
N_2	1	1	1	–
O_2	1	1	1	–
S	1	–	–	–
SO_2	1	1	–	–
SO_3	–	1	1	–
H_2SO_4	–	–	1	1
H_2O	–	–	1	1
Total	**4**	**4**	**5**	**2**

	Torre de Ácido	Tanque de dilución	Proceso	Global
N_2	1	–	4	1
O_2	1	–	4	1
S	–	–	1	1
SO_2	–	–	2	1
SO_3	1	–	3	1
H_2SO_4	1	1	4	1
H_2O	1	1	4	1
Total	**5**	**2**	**22**	**7**

En las condiciones especificadas, el proceso tiene cero grados de libertad, pero no hay ninguna unidad con cero y, como se conoce un flujo, no puede tomarse una base de cálculo.

Por tanto debe ignorarse el flujo conocido y tomar base de cálculo en la unidad con un grado de libertad: quemador o tanque de dilución.

Los nuevos grados de libertad, desconociendo el flujo, se muestran como **G de L***.

Si se toma la base de cálculo en el tanque de dilución ($F^{13}_{H_2O}$, por ejemplo), luego de resolver sus balances sólo se conocería F^{12} para la torre de ácido, quedando sus grados de libertad en 1 y ahí se pararía el desarrollo.

Debe tomarse, por tanto, la base en el quemador.

Estrategia de Solución:

1. Tomando base de cálculo en el Quemador conocemos: N^2, N^1_S, $N^3_{O_2}$, $N^3_{SO_2}$, $N^3_{N_2}$, r_1. Se agota el balance de S y R_1.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Global: G de L A = 2 – 2 (N^1_S, N^2) – 1(r_1) + 1(R_1 agotada) + 1(balance agotado:S)=1
   Convertidor: G de L A = 3 – 3 ($N^3_{O_2}$, $N^3_{N_2}$, $N^3_{SO_2}$) = 0

3. Resolviendo Convertidor se conoce: $N^4_{O_2}$, $N^4_{SO_3}$, $N^4_{N_2}$, r_2. Se agota el balance de SO_2.

4. Actualizando grados de libertad
   Torre de óleum: G de L A = 3 – 3 ($N^4_{O_2}$, $N^4_{N_2}$, $N^4_{SO_3}$) = 0
   Global: G de L A = 1 – 1 (r_2) + 1 (balance agotado: SO_2) = 1

5. Resolviendo Torre de óleum se conoce N^6, $x^6_{N_2}$, F^7, F^5, r_3'.

6. Actualizando grados de libertad:
   Torre de ácido: G de L A = $2 - 2\ (N^{6}, x^{6}_{N_2}) = 0$
   Divisor: G de L A = $3 - 1\ (F^{7}) = 2$
   Global: G de L A = $1 - 1\ (F^{5}) = 0$

7. Resolviendo la Torre de ácido se conoce: $N^{11}_{O_2}$, $N^{11}_{N_2}$, F^{12}, F^{10}, r_3". Se agotan los balances de O_2, SO_3, N_2.

8. Actualizo grados de libertad:
   Divisor: G de L A = $2 - 1\ (F^{10}) = 1$
   Tanque de dilución: G de L A = $1 - 1\ (F^{12}) = 0$
   Global: G de L A = $0 - 2\ (N^{11}_{O_2}, N^{11}_{N_2}) + 3$ (balances agotados) $= 1$

9. Resolviendo el Tanque de disolución se conoce: $F^{13}_{H_2O}$, F^{9}.

10. Actualizando grados de libertad:
    Divisor: G de L A = $1 - 1\ (F^{9}) = 0$
    Global: G de L A = $1 - 1\ (F^{13}_{H_2O}) = 0$

11. Se resuelve el Divisor y se comprueba en globales.

CÁLCULOS:

Balances en el Quemador:

Base de cálculo: **Sea $N^{1}_{S} = 100$**

Nota: R_1 se cambia a 80% en exceso porque con el 50% planteado en el problema no habría oxígeno en la corriente 11.

R_1: $0.21 \times N^{2} = 1.8 \times 100$

$$\mathbf{N^{2} = 857.143}$$

S: $0 = 100 - r_1$

$$\mathbf{r_1 = 100}$$

SO_2: $N^3_{SO_2} = 0 + 100$

$$\mathbf{N^3_{SO_2} = 100}$$

N_2: $N^3_{N_2} = 0.79 \times 857.143$

$$\mathbf{N^3_{N_2} = 677.143}$$

O_2: $N^3_{O_2} = 0.21 \times 857.143 - 100$

$$\mathbf{N^3_{O_2} = 80}$$

Balances en el Convertidor:

N_2: $\mathbf{N^4_{N_2} = 677.143}$

SO_2: $\mathbf{r_2 = 100}$

SO_3: $N^4_{SO_3} = 0 + 100$

$$\mathbf{N^4_{SO_3} = 100}$$

O_2: $N^4_{O_2} = 80 - 0.5 \times 100$

$$\mathbf{N^4_{O_2} = 30}$$

Balances en la Torre de óleum:

O_2: $(1 - 0.12 - x^6_{N_2})\, N^6 = 30$ (1)

N_2: $x^6_{N_2} \times N^6 = 677.143$ (2)

Resolviendo el sistema de 2 ecuaciones y 2 incógnitas, tenemos que:

$$\mathbf{N^6 = 803.568} \qquad \mathbf{x^6_{N_2} = 0.84267}$$

H_2SO_4: $(1 - 0.375) \times F^5 = 0.9 \times F^7 + 98 \times r_3'$ (1)

H_2O: $0 = 0.1 \times F^7 - 18 \times r_3'$ (2)

SO_3: $0.12 \times 803.568 \times 80 + 0.375 \times F^5 = 80 \times 100 - 80 \times r_3'$ (3)

Resolviendo el sistema de 3 ecuaciones y 3 incógnitas:

$$\mathbf{F^5 = 503.69} \qquad \mathbf{F^7 = 217.943} \qquad \mathbf{r_3' = 1.2108}$$

Balances en la Torre de ácido:

N_2: $\mathbf{N^{11}_{N_2} = 677.143}$

O_2: $\mathbf{N^{11}_{O_2} = 30}$

SO_3: $0 = 0.12 \times 803.568 - r3''$

$$\mathbf{r_3'' = 96.428}$$

H_2SO_4: $0.9 \times F^{10} = 0.8 \times F^{12} + 98 \times 96.428$ (1)

H_2O: $0.1 \times F^{10} = 0.2 \times F^{12} - 18 \times 96.428$ (2)

Resolviendo el sistema de 2 ecuaciones:

$$\mathbf{F^{10} = 32785.52} \qquad \mathbf{F^{12} = 25071.280}$$

Balances en el Tanque de dilución:

H_2SO_4: $0.9 \times F^9 = 0.8 \times 25071.280$

$$\mathbf{F^9 = 22285.58}$$

H_2O: $0.2 \times 25071.28 = 0.1 \times 22285.58 + F^{13}_{H_2O}$

$$\mathbf{F^{13}_{H_2O} = 2785.698}$$

Balances en el Divisor:

Total: $32785.52 = 217.943 + F^{8} + 22285.58$

$$\mathbf{F^{8} = 10281.997}$$

Comprobando en el balance global de ácido sulfúrico:

$$0.625 \times 503.69 + 0.9 \times 10281.997 = 0 + 98 \times (1.2108 + 96.428)$$

$$9568.60 = 9568.60$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Quemador:

Base de cálculo: **Sea $N^1_S = 100$**

R_1: $0.21 \times N^2 = 1.8 \times N^1_S$ (1)

S: $0 = N^1_S - r_1$ (2)

SO_2: $N^3_{SO_2} = 0 + r_1$ (3)

N_2: $N^3_{N_2} = 0.79 \times N^2$ (4)

O_2: $N^3_{O_2} = 0.21 \times N^2 - r_1$ (5)

Convertidor:

N_2: $$N_{N_2}^4 = N_{N_2}^3 \quad (6)$$

SO_2: $$0 = N_{SO_2}^3 - r_2 \quad (7)$$

SO_3: $$N_{SO_3}^4 = 0 + r_2 \quad (8)$$

O_2: $$N_{O_2}^4 = N_{O_2}^3 - 0.5 \times r_2 \quad (9)$$

Torre de óleum:

O_2: $$(1 - 0.12 - x_{N_2}^6)\, N^6 = N_{O_2}^4 \quad (10)$$

N_2: $$x_{N_2}^6 \times N^6 = N_{N_2}^4 \quad (11)$$

H_2SO_4: $$(1 - 0.375) \times F^5 = 0.9 \times F^7 + 98 \times r_3' \quad (12)$$

H_2O: $$0 = 0.1 \times F^7 - 18 \times r_3' \quad (13)$$

SO_3: $$0.12 \times N^6 \times 80 + 0.375 \times F^5 = 80 \times N_{SO_3}^4 - 80 \times r_3' \quad (14)$$

Torre de ácido:

N_2: $$N_{N_2}^{11} = x_{N_2}^6 \times N^6 \quad (15)$$

O_2: $$N_{O_2}^{11} = (1 - 0.12 - x_{N_2}^6)\, N^6 \quad (16)$$

SO_3: $$0 = 0.12 \times N^6 - r_3'' \quad (17)$$

H_2SO_4: $$0.9 \times F^{10} = 0.8 \times F^{12} + 98 \times r_3'' \quad (18)$$

H_2O: $$0.1 \times F^{10} = 0.2 \times F^{12} - 18 \times r_3'' \quad (19)$$

Tanque de dilución:

H_2SO_4: $$0.9 \times F^9 = 0.8 \times F^{12} \quad (20)$$

H_2O: $$0.2 \times F^{12} = 0.1 \times F^9 + F_{H_2O}^{13} \quad (21)$$

Divisor:

Total: $$F^{10} = F^{7} + F^{8} + F^{9} \qquad (22)$$

Resolviendo el sistema formado por 22 ecuaciones y 22 incógnitas, tendremos que:

$F^{10} = 32785.71429$

$F^{12} = 25071.42857$

$F^{13}_{H_2O} = 2785.71429$

$F^{5} = 503.63196$

$F^{7} = 217.91768$

$F^{8} = 10282.08232$

$F^{9} = 22285.71429$

$N^{11}_{N_2} = 677.14286$

$N^{11}_{O_2} = 30$

$N^{2} = 857.14286$

$N^{3}_{N_2} = 677.14286$

$N^{3}_{O_2} = 80$

$N^{3}_{SO_2} = 100$

$N^{4}_{N_2} = 677.14286$

$N^{4}_{O_2} = 30$

$N^{4}_{SO_3} = 100$

$N^{6} = 803.57143$

$r_1 = 100$

$r_2 = 100$

$r_3' = 1.21065$

$r_3'' = 96.42857$

$x^{6}_{N_2} = 0.8426667$

Luego:

$$r_3 = r_3' + r_3''$$

$$\mathbf{r_3 = 97.639225}$$

Para calcular los flujos de todas las corrientes para $F^{8} = 20000$ se halla la relación de escalado:

$$\textbf{Relación de escalado} = \left(\frac{\mathbf{20000}}{\mathbf{10282.08232}}\right) = \mathbf{1.94513}$$

y se multiplican por este valor los resultados anteriores.

Así:

$$N^{1}_{S} = 100 \times 1.94513 = 194.513 \text{ lbmol/día}$$

3.27. Puede producirse benceno mediante la desalquilación de tolueno, siguiendo la reacción:

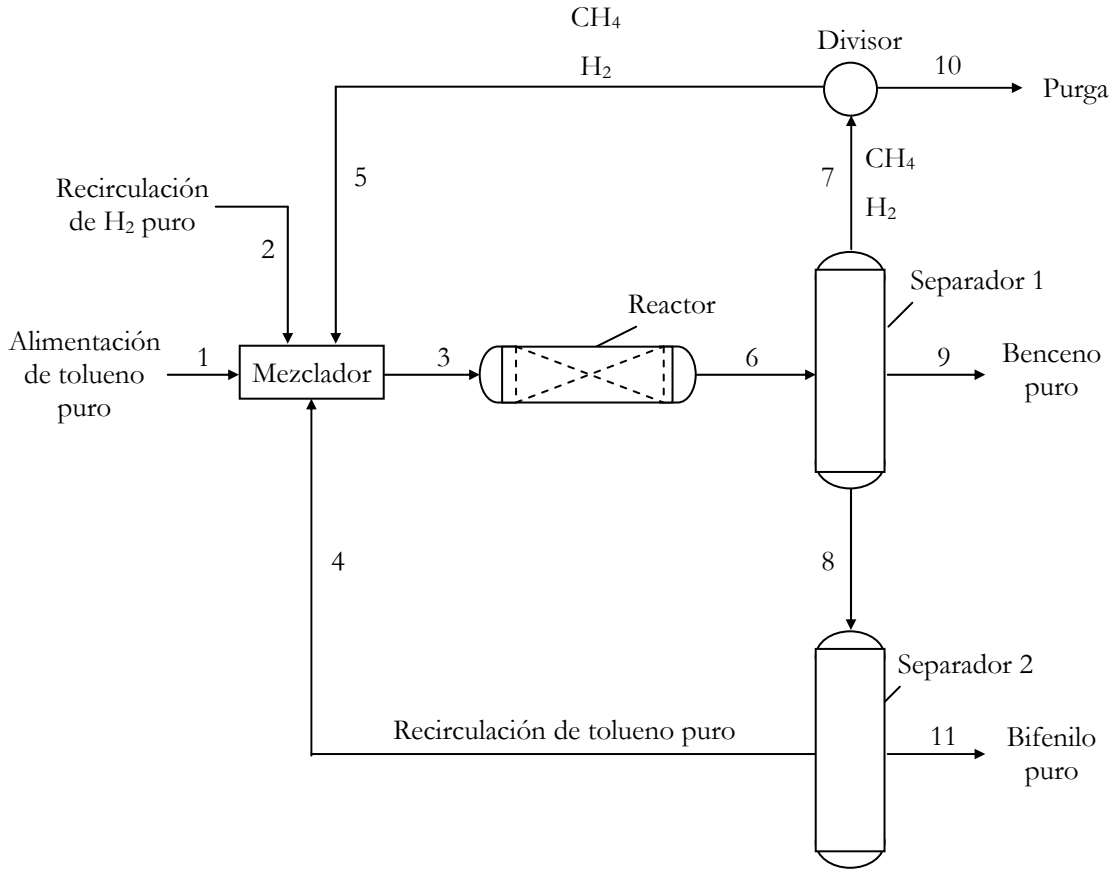
$$C_6H_5CH_3 + H_2 \longrightarrow C_6H_6 + CH_4$$

Sin embargo, esta reacción catalítica ocurre acompañada de la reacción:

$$2\ C_6H_5CH_3 + H_2 \longrightarrow (C_6H_5)_2 + 2\ CH_4$$

para obtener el subproducto indeseado bifenilo.

Debido a esta reacción paralela, debe mantenerse la conversión de tolueno abajo del 100% y deben efectuarse una serie de separaciones con recirculación, de los reactivos no utilizados.



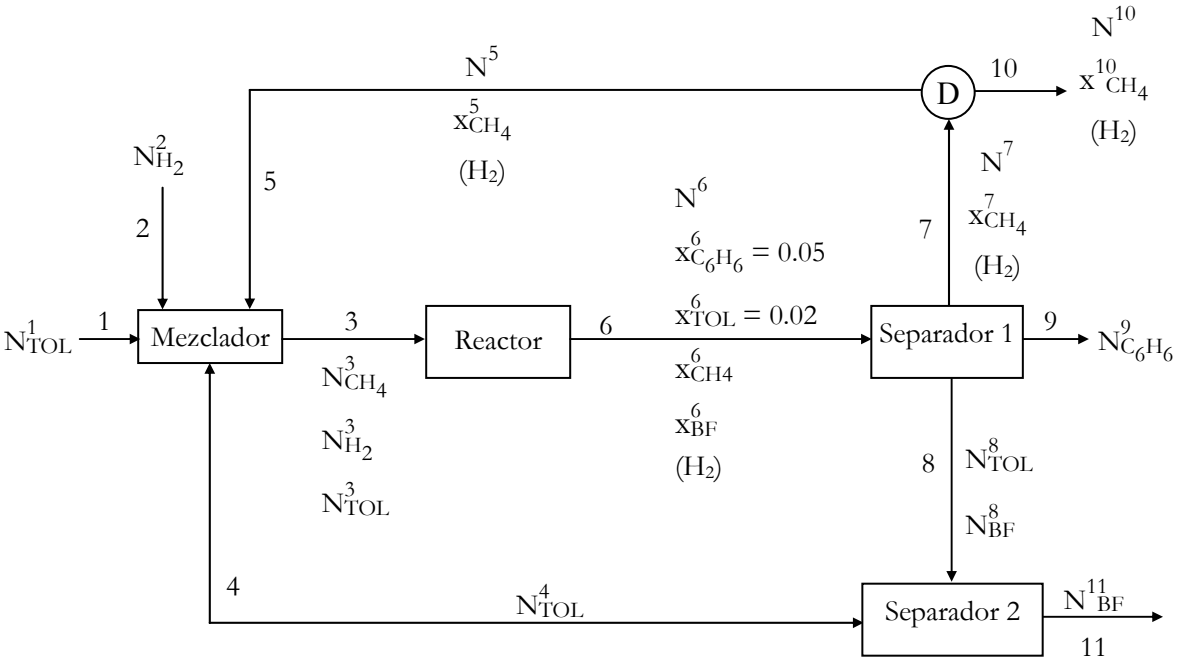
En el diagrama de flujo que se muestra en la figura, usando una alimentación al reactor (corriente 3) que contiene 5 moles de H_2 por mol de tolueno, se alcanza una conversión de tolueno de 75%.

a. Suponiendo que la corriente de salida 6 contiene 5 % de benceno y 2 % de tolueno, calcule el rendimiento fraccional de benceno en el reactor y las moles de H_2 necesarias para reposición, por mol de tolueno alimentado.

b. Suponiendo que, alternativamente, se especifique un contenido de 2 % de tolueno y 58 % de CH_4 en la corriente 6, calcule el rendimiento fraccional de benceno.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: $\dfrac{N^3_{H_2}}{N^3_{TOL}} = 5$ R_2: X_{TOL} en el reactor = 0.75

R_3: Restricciones del divisor = (2 – 1) (2 – 1) =1

Las reacciones son:

$$C_6H_5CH_3 + H_2 \xrightarrow{r_1} C_6H_6 + CH_4$$

$$2\ C_6H_5CH_3 + H_2 \xrightarrow{r_2} (C_6H_5)_2 + 2\ CH_4$$

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	Reactor	Separador 1	Separador 2	Divisor	Proceso	Global
NVI	8	8 + 2	10	4	6	21 + 2	6 + 2
NBMI	3	5	5	2	2	17	5
NFC	0	0	0	0	0	0	0
NCC	0	2	2	0	0	2	0
NRC R_1	1	1	–	–	–	1	–
R_2	–	1	–	–	–	1	–
R_3	–	–	–	–	1	1	–
G de L	**4**	**1**	**3**	**2**	**3**	**1**	**3**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 8 (N^1_{TOL}, $N^2_{H_2}$, N^4_{TOL}, N^5, $x^5_{CH_4}$, $N^3_{CH_4}$, $N^3_{H_2}$, N^3_{TOL})

Ecuaciones = 3 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 4

Reactor: Incógnitas = 8 ($N^3_{CH_4}$, $N^3_{H_2}$, N^3_{TOL}, N^6, $x^6_{CH_4}$, x^6_{BF}, r_1, r_2)

Ecuaciones = 5 (balances) + 2 (R_1, R_2)

G de L = 1

Separador 1: Incógnitas = 8 (N^6, $x^6_{CH_4}$, x^6_{BF}, N^8_{TOL}, N^8_{BF}, $N^9_{C_6H_6}$, N^7, $x^7_{CH_4}$)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 3

Separador 2: Incógnitas = 4 (N^4_{TOL}, N^8_{TOL}, N^8_{BF}, N^{11}_{BF})

Ecuaciones = 2 (balances)

G de L = 2

Divisor: Incógnitas = 6 (N^{7}, $x^{7}_{CH_4}$, N^{5}, $x^{5}_{CH_4}$, N^{10}, $x^{10}_{CH_4}$)

Ecuaciones = 2 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 3

Global: Incógnitas = 8 (N^{1}_{TOL}, $N^{2}_{H_2}$, $N^{9}_{C_6H_6}$, N^{10}, $x^{10}_{CH_4}$, N^{11}_{BF}, r_1, r_2)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 3

Tabla de Balances:

	Mezclador	**Reactor**	**Separador 1**	**Separador 2**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
TOL	1	1	1	1	–	4	1
H_2	1	1	1	–	1	4	1
CH_4	1	1	1	–	1	4	1
C_6H_6	–	1	1	–	–	2	1
BF	–	1	1	1	–	3	1
Total	**3**	**5**	**5**	**2**	**2**	**17**	**5**

a. Suponiendo que la corriente de salida 6 contiene 5 % de benceno y 2 % de tolueno, calcule el rendimiento fraccional de benceno en el reactor y las moles de H_2 necesarias para reposición, por mol de tolueno alimentado.

Estrategia de Solución:

1. Se toma base de cálculo N^{6} en el Reactor y se halla: $N^{3}_{CH_4}$, $N^{3}_{H_2}$, N^{3}_{TOL}, $x^{6}_{CH_4}$, x^{6}_{BF}, r_1 y r_2. Se agotan R_1 y R_2.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Mezclador: G de L A = 4 – 3 ($N^{3}_{CH_4}$, $N^{3}_{H_2}$, N^{3}_{TOL}) + 1 (R_1 agotada) = 2
   Separador 1: G de L A = 3 – 1 (N^{6}) – 2 ($x^{6}_{CH_4}$, x^{6}_{BF}) = 0
   Global: G de L A = 3 – 2 (r_1, r_2) = 1

3. Se resuelve Separador 1 y se hallan: N^{7}, $x^{7}_{CH_4}$, $N^{9}_{C_6H_6}$, N^{8}_{TOL}, N^{8}_{BF}, y por arrastre del divisor ($x^{10}_{CH_4}$ y $x^{5}_{CH_4}$). Se agota balance de C_6H_6.

4. Actualizando grados de libertad:
   Global: G de L A = $1 - 1\ (N^{9}_{C_6H_6}) - 1\ (x^{10}_{CH_4}) + 1$ (balance agotado: C_6H_6) = 0
   Separador 2: G de L A = $2 - 2\ (N^{8}_{TOL}, N^{8}_{BF}) = 0$
   Mezclador: G de L A = $2 - 1\ (x^{5}_{CH_4}) = 1$
   Divisor: G de L A = $3 - 1\ (N^{7}) - 1\ (x^{7}_{CH_4}) = 1$

5. Se resuelve Separador 2 y se hallan N^{4}_{TOL}, N^{11}_{BF}. Se agota el balance de BF.

6. Reconfirmando grados de libertad:
   Global: G de L A = $0 - 1\ (N^{11}_{BF}) + 1$ (balance agotado: BF) = 0

7. Se resuelven Globales y se halla: N^{1}_{TOL}, $N^{2}_{H_2}$, N^{10} y se agota el balance de tolueno.

8. Actualizando grados de libertad:
   Global: G de L A = $1 - 1\ (N^{10}) = 0$
   Mezclador: G de L A = $1 - 1(N^{4}_{TOL}, N^{1}_{TOL}, N^{2}_{H_2}) + 1$(balance agotador: Tolueno) = 1

9. Se resuelve el Divisor y se comprueban los resultados en el Mezclador.

CÁLCULOS:

Balances en el Reactor:

Base de cálculo: Sea $N^{6} = 1000$

De R_2: $0.02\ N^{6} = 0.25 \times N^{3}_{TOL}$

$$\mathbf{N^{3}_{TOL} = 80}$$

De R_1: $N^{3}_{H_2} = 5 \times 80$

$$\mathbf{N^{3}_{H_2} = 400}$$

C_6H_6: $0.05 \times 1000 = 0 + r_1$

$$\mathbf{r_1 = 50}$$

Tolueno: $20 = 80 - 50 - 2\ r_2$

$$\mathbf{r_2 = 5}$$

BF: $x^6_{BF} \times 1000 = 0 + 5$

$$\mathbf{x^6_{BF} = 0.005}$$

H_2: $(1 - 0.05 - 0.02 - 0.005 - x^6_{CH_4}) \times 1000 = 400 - 50 - 5$

$$\mathbf{x^6_{CH_4} = 0.58}$$

CH_4: $0.58 \times 1000 = N^3_{CH4} + 50 + 2 \times 5$

$$\mathbf{N^3_{CH_4} = 520}$$

Comprobando los resultados en el balance de materia:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
CH_4	520	8320
H_2	400	800
Tolueno	80	7360
Total		**16480**

→ Reactor →

SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
C_6H_6	50	3900
Tolueno	20	1840
CH_4	580	9280
Bifenilo	5	770
H_2	345	690
Total		**16480**

Cálculo del Rendimiento:

Tolueno que reacciona = $N^3_{TOL} = 60$

Por la relación estequiométrica:

$(N^6_{C_6H_6})$ máximo = 60, cuando $r_2 = 0$

$$\textbf{Rendimiento} = \frac{\mathbf{C_6H_6\ real}}{\mathbf{C_6H_6\ teórico}} \times 100\ \%$$

$$\textbf{Rendimiento} = \frac{\mathbf{N^9_{C_6H_6}}}{60} \times 100\ \% = \frac{50}{60} \times 100\ \% = 83.333\ \%$$

Moles de hidrógeno necesarias para reposición:

$$\frac{\mathbf{N^2_{H_2}}}{\mathbf{N^1_{TOL}}} = \frac{90.694}{60} = 1.512$$

Balances en el Separador 1:

C_6H_6: $\quad 50 = N^9_{C_6H_6}$

Tolueno: $\quad 20 = N^8_{TOL}$

BF: $\quad 5 = N^8_{BF}$

CH_4: $\quad 580 = x^7_{CH_4} \times N^7 \quad (1)$

H_2: $\quad 345 = (1 - x^7_{CH_4}) \times N^7 \quad (2)$

Resolviendo el sistema de 2 ecuaciones:

$$N^7 = 925 \qquad x^7_{CH_4} = x^5_{CH_4} = x^{10}_{CH_4} = 0.627$$

Comprobando en el balance Total:

$$N^6 = N^7 + N^9_{C_6H_6} + N^8_{TOL} + N^8_{BF}$$

$$1000 = 925 + 50 + 20 + 5 = 1000$$

Balances en el Separador 2:

Tolueno: $\quad 20 = N^4_{TOL}$

BF: $\quad 5 = N^{11}_{BF}$

Se comprueba en total:

$$N_{TOL}^{8} + N_{BF}^{8} = N_{TOL}^{4} + N_{BF}^{11}$$

$$20 + 5 = 20 + 5$$

$$25 = 25$$

Balances Globales:

Tolueno: $0 = N_{TOL}^{1} - 50 - 2 \times 5$

$$\mathbf{N_{TOL}^{1} = 60}$$

CH_4: $0.627 \times N^{10} = 0 + 50 + 10$

$$\mathbf{N^{10} = 95.694}$$

H_2: $(1 - 0.627) \times 95.694 = N_{H_2}^{2} - 50 - 5$

$$\mathbf{N_{H_2}^{2} = 90.694}$$

Comprobando en el balance de materia:

ENTRADA				SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**		**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
				CH_4	60.000	960
Tolueno	60.000	5520.000	→ Globales →	H_2	35.694	71.388
H_2	90.694	181.388		C_6H_6	50.000	3900
				Bifenilo	5.000	770
Total		**5701.388**		**Total**		**5701.388**

Balances en el Divisor:

Total: $925 = 95.694 + N^{5}$

$$\mathbf{N^{5} = 829.306}$$

Finalmente, comprobando en el Mezclador:

$$60 + 90.694 + 20 + 829.306 = 520 + 400 + 80$$

$$1000 = 1000$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Reactor:

Base de cálculo: Sea $N^6 = 1000$

De R_2: $$0.02\, N^6 = 0.25\, N^3_{TOL} \quad (1)$$

De R_1: $$N^3_{H_2} = 5 \times N^3_{TOL} \quad (2)$$

C_6H_6: $$0.05 \times N^6 = 0 + r_1 \quad (3)$$

Tolueno: $$0.02 \times N^6 = N^3_{TOL} - r_1 - 2\, r_2 \quad (4)$$

BF: $$x^6_{BF} \times N^6 = 0 + r_2 \quad (5)$$

H_2: $$(1 - 0.05 - 0.02 - x^6_{BF} - x^6_{CH_4}) \times N^6 = N^3_{H_2} - r_1 - r_2 \quad (6)$$

CH_4: $$x^6_{CH_4} \times N^6 = N^3_{CH_4} + r_1 + 2\, r_2 \quad (7)$$

Separador 1:

C_6H_6: $$0.05 \times N^6 = N^9_{C_6H_6} \quad (8)$$

Tolueno: $$0.02 \times N^6 = N^8_{TOL} \quad (9)$$

BF: $$x^6_{BF} \times N^6 = N^8_{BF} \quad (10)$$

CH_4: $$x^6_{CH_4} \times N^6 = x^7_{CH_4} \times N^7 \quad (11)$$

H_2: $(1 - 0.05 - 0.02 - x^{6}_{BF} - x^{6}_{CH_4})\, N^{6} = (1 - x^{7}_{CH_4}) \times N^{7}$ (12)

De la restricción: $x^{7}_{CH_4} = x^{10}_{CH_4}$ (13)

Separador 2:

Tolueno: $N^{8}_{TOL} = N^{4}_{TOL}$ (14)

BF: $N^{8}_{BF} = N^{11}_{BF}$ (15)

Globales:

Tolueno: $0 = N^{1}_{TOL} - r_1 - 2 \times r_2$ (16)

CH_4: $x^{10}_{CH_4} \times N^{10} = 0 + r_1 + 2 \times r_2$ (17)

H_2: $(1 - x^{10}_{CH_4})\, N^{10} = N^{2}_{H_2} - r_1 - r_2$ (18)

Divisor:

Total: $N^{7} = N^{10} + N^{5}$ (19)

Resolviendo el sistema de 19 ecuaciones con 19 incógnitas, tenemos que:

$N^{10} = 95.689656$
$N^{11}_{BF} = 5$
$N^{1}_{TOL} = 60$
$N^{2}_{H_2} = 90.68966$
$N^{3}_{CH_4} = 520$
$N^{3}_{H_2} = 400$
$N^{3}_{TOL} = 80$
$N^{4}_{TOL} = 20$
$N^{5} = 829.310345$

$N^{7} = 925$
$N^{8}_{BF} = 5$
$N^{8}_{TOL} = 20$
$N^{9}_{C_6H_6} = 50$
$r_1 = 50$
$r_2 = 5$
$x^{10}_{CH_4} = 0.627033$
$x^{6}_{BF} = 0.005$
$x^{6}_{CH_4} = 0.58$
$x^{7}_{CH_4} = 0.627033$

b. Suponiendo que, alternativamente, se especifique un contenido de 2 % de tolueno y 58 % de CH_4 en la corriente 6, calcule el rendimiento fraccional de benceno.

Tanto los grados de libertad como el balance permanecen iguales, ya que las composiciones dadas corresponden exactamente a las calculadas en la parte **a.**, así, el rendimiento fraccional sigue siendo 83.33 %.

3.28. El producto P se obtiene a partir del reactivo R de acuerdo con la reacción:

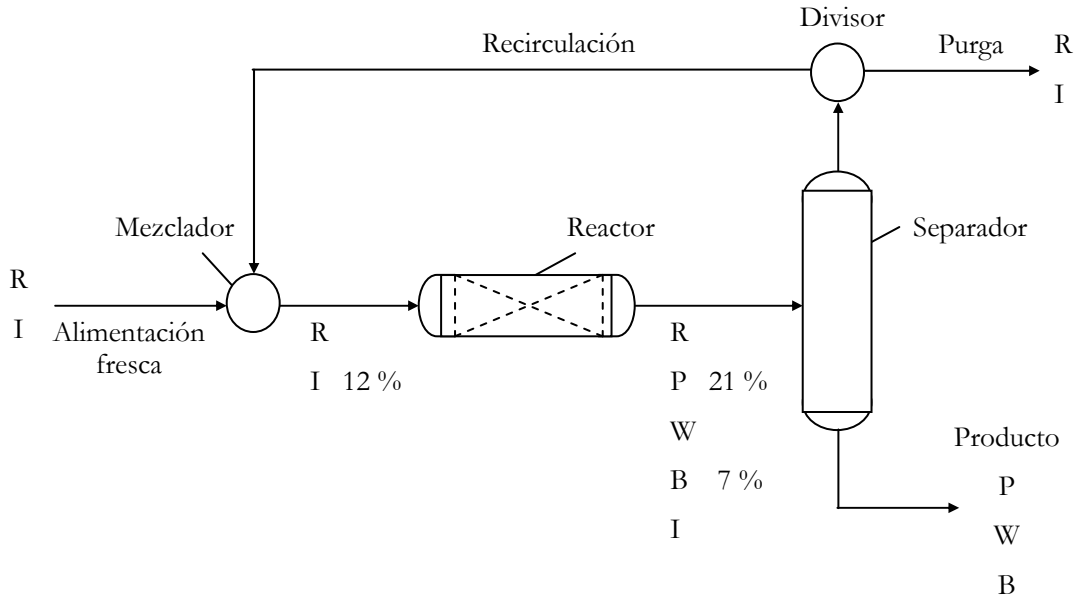
$$2\,R \longrightarrow P + W$$

Con las reacciones paralelas:

$$R \longrightarrow B + W$$

$$P \longrightarrow 2\,B + W$$

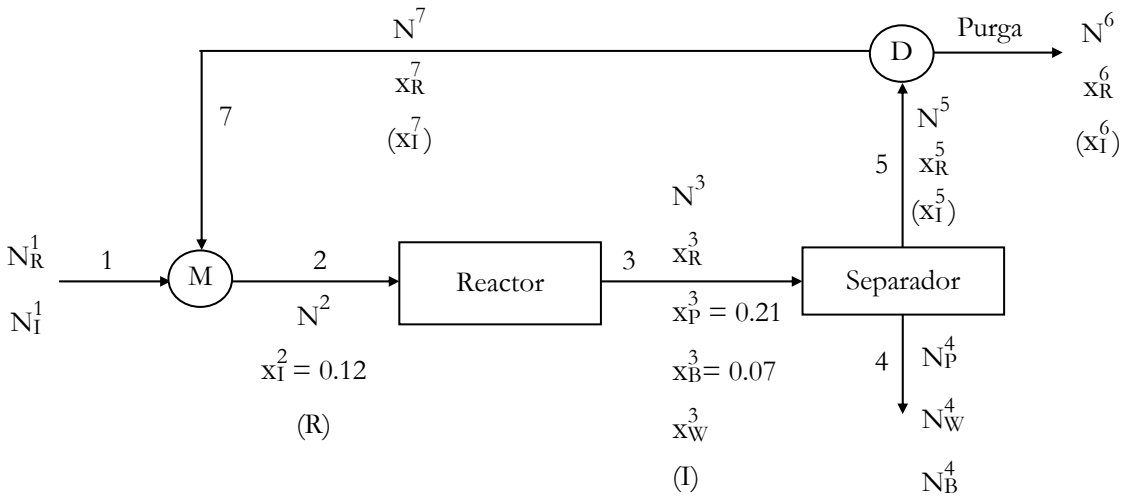
Cuando se utiliza una alimentación fresca que contiene un mol de inertes I por cada 11 moles de R, se logra únicamente una conversión de R de 50% en el reactor. El R que no reaccionó y los inertes se separan de los productos del reactor y se recirculan.



Algo del R que no reaccionó y de los inertes se purgan, para limitar al 12 % (mol) el nivel de inertes en la alimentación combinada al reactor. Si el análisis de la corriente de salida del reactor indica 21 % de P y 7 % de B, en base molar, calcule todos los flujos en el proceso, para un flujo de alimentación fresca de 100 mol/h.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: $N_R^1 = 11\, N_I^1$

R_2: $x_R^3 N^3 = 0.5 \times 0.88 \times N^2$

R_3: Restricciones del divisor = $(2 - 1)(2 - 1) = 1$

Las reacciones son:

$$2\,R \longrightarrow P + W \qquad r_1$$

$$R \longrightarrow B + W \qquad r_2$$

$$P \longrightarrow 2\,B + W \qquad r_3$$

El arreglo estequiométrico correspondiente es:

	1a. Reacción	2a. Reacción	3a. Reacción
R	– 2	– 1	0
P	1	0	– 1
B	0	1	2
W	1	1	1

El arreglo reducido es:

R	1	0	0
P	0	1	0
B	– 1	– 2	0
W	– 1	– 1	0

Así que solo hay dos reacciones independientes que son:

$$B + W \longrightarrow R \qquad r_1$$

$$2\,B + W \longrightarrow P \qquad r_2$$

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	**Reactor**	**Separador**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
NVI	6	7 + 2	10	6	18 + 2	7 + 2
NBMI	2	5	5	2	14	5
NFC	0	0	0	0	0	0
NCC	1	3	2	0	3	0
NRC R_1	1	–	–	–	1	1
R_2	–	1	–	–	1	–
R_3	–	–	–	1	1	–
G de L	**2**	**0**	**3**	**3**	**0**	**3**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 5 (N_R^1, N_I^1, N^2, N^7, x_R^7)

Ecuaciones = 2 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 2

Reactor: Incógnitas = 6 (N^2, N^3, x_R^3, x_W^3, r_1, r_2)

Ecuaciones = 5 (balances) + 1 (R_2)

G de L = 0

Separador: Incógnitas = 8 (N^3, x_R^3, x_W^3, N_P^4, N_W^4, N_B^4, N^5, x_R^5)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 3

Divisor: Incógnitas = 6 (N^5, x_R^5, N^6, x_R^6, N^7, x_R^7)

Ecuaciones = 2 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 3

Global: Incógnitas = 9 (N_R^1, N_I^1, N_P^4, N_W^4, N_B^4, N^6, x_R^6, r_1, r_2)

Ecuaciones = 5 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 3

Tabla de Balances:

	Mezclador	Reactor	Separador	Divisor	Proceso	Global
R	1	1	1	1	4	1
P	–	1	1	–	2	1
B	–	1	1	–	2	1
W	–	1	1	–	2	1
I	1	1	1	1	4	1
Total	2	5	5	2	14	5

El problema se encuentra sobre-especificado. Sin embargo a pesar de sobrar información, debe analizarse si ella es contradictoria. La solución empezará tomando base de cálculo en el reactor.

Estrategia de Solución:

1. Tomando base de cálculo en el reactor, este queda sobre-especificado, resolviéndolo y comprobando si la información no es contradictoria, se conocen: N^2, N^3, x_R^3, x_W^3, r_1, r_2, y se agota R_2.

2. Actualizando grados de libertad:
   Mezclador: G de L A = 2 – 1 (N^2) = 1
   Separador: G de L A = 3 – 1 (N^3) – 2 (x_R^3, x_W^3) = 0
   Global: G de L A = 3 – 2 (r_1, r_2) = 1

3. Resolviendo el Separador se conocen: N_P^4, N_W^4, N_B^4, N^5, x_R^5, y arrastro x_R^7 y x_R^6; se agotan los balances de P, B y W.

4. Actualizando grados de libertad:
   Mezclador: G de L A = $1 - 1\ (x_R^7) = 0$
   Divisor: G de L A = $3 - 1\ (N^5) - 1\ (x_R^5) = 1$
   Global: G de L A = $1 - 3(N_P^4, N_W^4, N_B^4) - 1(x_R^6) + 3$(balances agotados:B,P,W)=0

5. Resolviendo Mezclador se conoce: N_R^1, N_I^1, N^7, y se agota R_1.

6. Actualizando grados de libertad:
   Divisor: G de L A = $1 - 1\ (N^7) = 0$
   Global: G de L A = $0 - 2\ (N_R^1, N_I^1) + 1$ (R_1 agotada) $= -1$

7. Se resuelve el Divisor.

8. Se comprueba en el balance Global.

Nota: En (6.) se puede reconfirmar grados de libertad Globales y resolverlos.

CÁLCULOS:

Balances en el Reactor:

Base de cálculo: **Sea $N^2 = 100$**

Balance de R: $x_R^3 \times N^3 = 0.88 \times 100 + r_1$ (1)

Balance de P: $0.21 \times N^3 = 0 + r_2$ (2)

Balance de B: $0.07 \times N^3 = 0 - r_1 - 2\ r_2$ (3)

Balance de W: $x_W^3 \times N^3 = 0 - r_1 - r_2$ (4)

De R_2: $x_R^3 \times N^3 = 44$ (5)

Resolviendo el sistema de 5 ecuaciones con 5 incógnitas, tenemos:

$N^3 = 89.7959$ **$r_1 = -44$** **$x_R^3 = 0.49$**

$r_2 = 18.8571$ **$x_W^3 = 0.28$**

Comprobando en el balance de I si la información es contradictoria o no, da:

$$\text{I:} \qquad (1 - 0.49 - 0.21 - 0.07 - 0.28) \times 89.7959 \quad = \quad 0.12 \times 100$$

$$-4.4898 \qquad \neq \qquad 12$$

Lo anterior significa que la información que sobra es contradictoria.

La posibilidad que se tiene es suprimir una de las informaciones en el reactor. Una de ellas puede ser x_B^3, planteándose nuevamente el problema.

Tabla de Grados de Libertad del nuevo planteamiento:

	Mezclador	**Reactor**	**Separador**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
NVI	6	7 + 2	10	6	18 + 2	7 + 2
NBMI	2	5	5	2	14	5
NFC	0	0	0	0	0	0
NCC	1	2	1	0	2	0
NRC R_1	1	–	–	–	1	1
R_2	–	1	–	–	1	–
R_3	–	–	–	1	1	–
G de L	**2**	**1**	**4**	**3**	**1**	**3**

Puede verse que el problema está correctamente especificado, la solución se empieza por el reactor.

Estrategia de Solución:

1. Tomando base de cálculo en el reactor y resolviéndolos se conoce: N^2, N^3, x_R^3, x_W^3, x_B^3, r_1, r_2, y se agota R_2.

2. Actualizando grados de libertad:
   Mezclador: G de L A = $2 - 1\ (N^2) = 1$
   Separador: G de L A = $4 - 1\ (N^3) - 3\ (x_B^3, x_R^3, x_W^3) = 0$
   Global: G de L A = $3 - 2\ (r_1, r_2) = 1$

3. Resolviendo el Separador se conocen: N_P^4, N_W^4, N_B^4, N^5, x_R^5, y arrastro x_R^7 y x_R^6; se agotan los balances de P, B y W.

4. Actualizando grados de libertad:
   Mezclador: G de L A = $1 - 1\ (x_R^7) = 0$
   Divisor: G de L A = $3 - 1\ (N^5) - 1\ (x_R^5) = 1$
   Global: G de L A = $1 - 3(N_P^4, N_W^4, N_B^4) - 1(x_R^6) + 3$(balances agotados:B,P,W)=0

5. Resolviendo Mezclador se conoce: N_R^1, N_I^1, N^7, y se agota R_1.

6. Actualizando grados de libertad:
   Divisor: G de L A = $1 - 1\ (N^7) = 0$
   Global: G de L A = $0 - 2\ (N_R^1, N_I^1) + 1$ (R_1 agotada) $= -1$

7. Se resuelve el Divisor.

8. Se comprueba en el balance Global.

Nota: En (6.) se puede reconfirmar grados de libertad Globales y resolverlos.

CÁLCULOS:

Balances en el Reactor:

Base de cálculo: **Sea $N^2 = 100$**

Balance de R: $$x_R^3 \times N^3 = 0.88 \times 100 + r_1 \quad (1)$$

Balance de P: $$0.21 \times N^3 = 0 + r_2 \quad (2)$$

Balance de B: $$x_B^3 \times N^3 = 0 - r_1 - 2\ r_2 \quad (3)$$

Balance de W: $$x_W^3 \times N^3 = 0 - r_1 - r_2 \quad (4)$$

Balance de I: $$(1 - 0.21 - x_R^3 - x_B^3 - x_W^3) \times N^3 = 0.12 \times 100 \quad (5)$$

De R_2: $$x_R^3 \times N^3 = 44 \quad (6)$$

Resolviendo el sistema de 6 ecuaciones con 6 incógnitas, tenemos:

$$\mathbf{N^3 = 101.4085} \qquad \mathbf{r_1 = -44} \qquad \mathbf{x_R^3 = 0.4339}$$

$$\mathbf{r_2 = 21.2958} \qquad \mathbf{x_W^3 = 0.2239} \qquad \mathbf{x_B^3 = 0.01389}$$

Balances en el Separador:

Balance de P: $\mathbf{N_P^4 = 21.2958}$

Balance de W: $\mathbf{N_W^4 = 22.704}$

Balance de B: $\mathbf{N_B^4 = 1.4086}$

Total: $N^5 + 21.2958 + 22.704 + 1.4086 = 101.4085$

$$\mathbf{N^5 = 55.9987}$$

Balance de R: $x_R^5 \times 55.9987 = 44.0011$

$$\mathbf{x_R^5 = 0.7858}$$

Se comprueba en el balance de I:

$$0.11 \times 101.4085 = (1 - 0.7858) \times 55.9987$$

$$11.99 = 11.99$$

Además se puede arrastrar $x_R^5 = x_R^7 = 0.7858$

Balances en el Mezclador:

Balance de R: $0.88 \times 100 = N_R^1 + 0.7858 \times N^7$ (1)

Total: $100 = N_R^1 + N_I^1 + N^7$ (2)

De R_1: $N_R^1 = 11 \times N_I^1$ (3)

Resolviendo el sistema de 3 ecuaciones:

$$\mathbf{N_R^1 = 65.9832} \qquad \mathbf{N_I^1 = 5.9985} \qquad \mathbf{N^7 = 28.0183}$$

Se comprueba en el balance de I:

$$0.12 \times 100 = 5.9985 + (1 - 0.7858) \times 28.0183$$

$$12 = 12$$

Balances en el Divisor:

Total: $28.0183 + N^6 = 55.9987$

$$\mathbf{N^6 = 27.9804}$$

Balance de R: $x_R^7 \times 28.0183 + x_R^6 \times 27.9804 = 0.7858 \times 55.9987$ (1)

De R_3: $x_R^6 = x_R^7$ (2)

Resolviendo las 2 ecuaciones planteadas:

$$\mathbf{x_R^6 = 0.7858} \qquad \mathbf{x_R^7 = 0.7858}$$

Se comprueba en el balance de I:

$$(1 - 0.7858) \times 28.0183 + (1 - 0.7858) \times 27.9804 = (1 - 0.7858) \times 55.9987$$
$$11.9949 = 11.9949$$

Finalmente, se comprueban los resultados en los balances Globales:

W: $22.7054 = 0 - (-44) - 21.2958$

$$22.7054 = 22.7042$$

I: $(1 - 0.7858) \times 27.9804 = 5.9985$

$$5.9934 = 5.9985$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Otro método de solución al anterior ejercicio, se logra mediante el planteamiento, en el orden secuencial de la estrategia de solución, de todas las ecuaciones involucradas en el proceso utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Reactor:

Base de cálculo: **Sea $N^2 = 100$**

Balance de R: $$x_R^3 \times N^3 = 0.88 \times N^2 + r_1 \quad (1)$$

Balance de P: $$0.21 \times N^3 = 0 + r_2 \quad (2)$$

Balance de B: $$x_B^3 \times N^3 = 0 - r_1 - 2\, r_2 \quad (3)$$

Balance de W: $$x_W^3 \times N^3 = 0 - r_1 - r_2 \quad (4)$$

Balance de I: $$(1 - 0.21 - x_R^3 - x_B^3 - x_W^3) \times N^3 = 0.12 \times N^2 \quad (5)$$

De R_2: $$x_R^3 \times N^3 = 0.44 \times N^2 \quad (6)$$

Balances en el Separador:

Balance de P: $$N_P^4 = 0.21 \times N^3 \quad (7)$$

Balance de W: $$N_W^4 = x_W^3 \times N^3 \quad (8)$$

Balance de B: $$N_B^4 = x_B^3 \times N^3 \quad (9)$$

Balance de R: $$x_R^5 \times N^5 = x_R^3 \times N^3 \quad (10)$$

Total: $$N^5 + N_P^4 + N_W^4 + N_B^4 = N^3 \quad (11)$$

Mezclador:

Balance de R: $$0.88 \times N^2 = N_R^1 + x_R^7 \times N^7 \quad (12)$$

Total: $$N^2 = N_R^1 + N_I^1 + N^7 \quad (13)$$

De R_1: $$N_R^1 = 11 \times N_I^1 \quad (14)$$

Divisor:

Balance de R: $x_R^7 \times N^7 + x_R^6 \times N^6 = x_R^5 \times N^5$ (15)

Total: $N^7 + N^6 = N^5$ (16)

De R_3: $x_R^6 = x_R^7$ (17)

Resolviendo el sistema de 17 ecuaciones con 17 incógnitas:

$N_I^1 = 6$
$N_R^1 = 66$
$N^3 = 101.408451$
$N_B^4 = 1.408451$
$N_P^4 = 21.295775$
$N_W^4 = 22.704225$
$N^5 = 56$
$N^6 = 28$
$N^7 = 28$
$r_1 = -44$
$r_2 = 21.295775$
$x_B^3 = 0.013889$
$x_R^3 = 0.433889$
$x_W^3 = 0.223889$
$x_R^5 = 0.785714$
$x_R^6 = 0.785714$
$x_R^7 = 0.785714$

3.29. La mayoría de los procesos modernos para la producción de ácido nítrico se basan en la oxidación progresiva de amoniaco a óxidos de nitrógeno, seguida de la absorción de estos productos intermedios en agua. En el diagrama de flujo que muestra la figura se mezcla amoníaco y aire en una proporción molar de 1 a 10 y se hacen reaccionar catalíticamente en la primera etapa del reactor. Las dos reacciones que se presentan son la reacción principal:

$$4\ NH_3 + 5\ O_2 \longrightarrow 4\ NO + 6\ H_2O$$

y la reacción secundaria:

$$2\ NH_3 + {}^3/_2\ O_2 \longrightarrow N_2 + 3\ H_2O$$

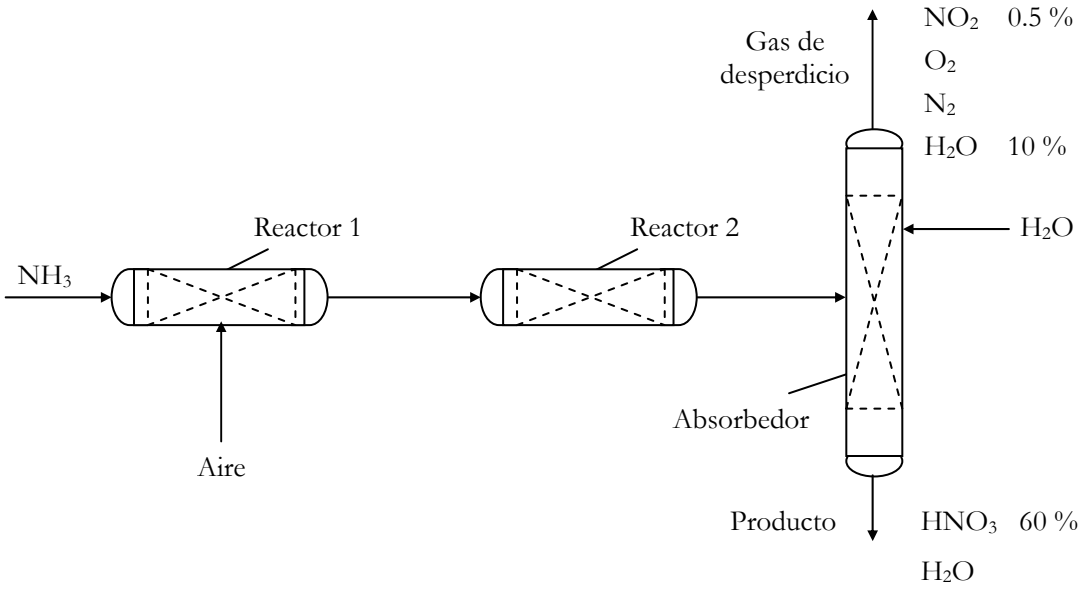
Todo el NH_3 se convierte, con una selectividad del 95 % para el NO.
En la segunda etapa de reactor se oxida el NO hasta NO_2 de acuerdo con la reacción:

$$NO + {}^1/_2\ O_2 \longrightarrow NO_2$$

Finalmente la descarga del reactor 2 se trata posteriormente con agua para obtener el producto deseado HNO_3 al 60 %. La reacción en el absorbedor es:

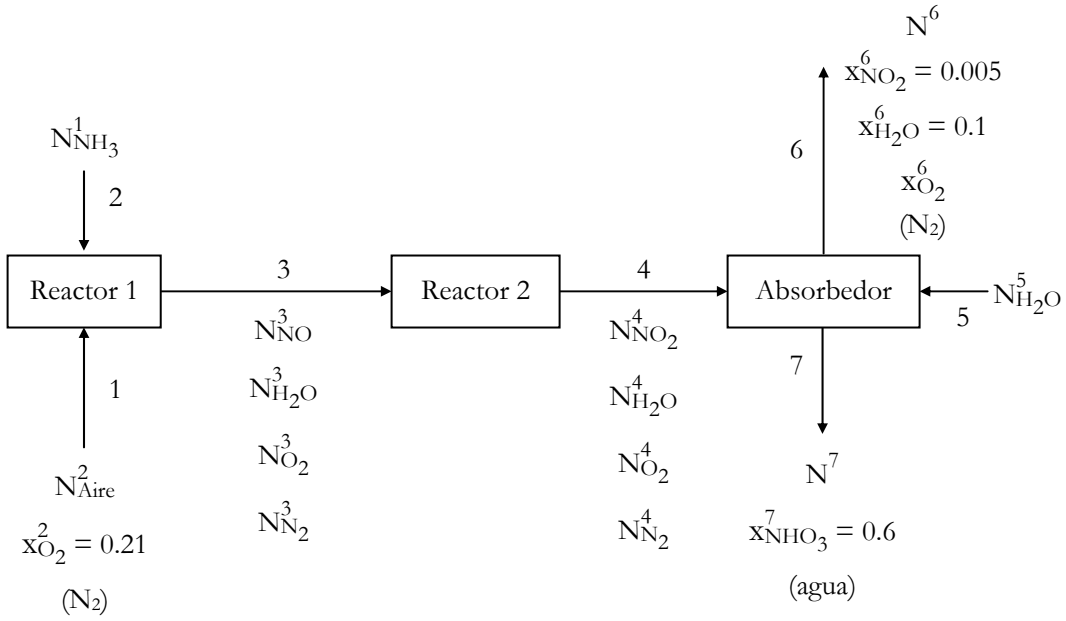
$$2\ NO_2 + {}^1/_2\ O_2 + H_2O \longrightarrow 2\ HNO_3$$

El gas de desperdicio del proceso contiene 0.5 % de NO_2 y alrededor de 10 % de agua. Puede considerarse a la composición del aire como 21 % de O_2 y 79 % de N_2. Suponiendo que todas las composiciones están en porcentaje en mol calcule la composición de todas las corrientes en el proceso.



SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

$$R_1: \quad N^2_{Aire} = 10\, N^1_{NH_3}$$

$$R_2: \quad N^3_{NO} = 0.95\, N^1_{NH_3}$$

Las reacciones del proceso son:

$$4\ NH_3 + 5\ O_2 \xrightarrow{r_1} 4\ NO + 6\ H_2O$$

$$2\ NH_3 + {}^3/_2\ O_2 \xrightarrow{r_2} N_2 + 3\ H_2O$$

Reactor 1

$$NO + {}^1/_2\ O_2 \xrightarrow{r_3} NO_2$$

Reactor 2

$$2\ NO_2 + {}^1/_2\ O_2 + H_2O \xrightarrow{r_4} 2\ HNO_3$$

Absorbedor

Tabla de Grados de Libertad:

	Reactor 1	Reactor 2	Absorbedor	Proceso	Global
NVI	7 + 2	8 + 1	11 + 1	18 + 4	10 + 4
NBMI	5	5	5	15	7
NFC	0	0	0	0	0
NCC	1	0	3	4	4
NRC R_1	1	0	0	1	1
R_2	1	0	0	1	0
G de L	**1**	**4**	**4**	**1**	**2**

El problema se encuentra correctamente especificado

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Reactor 1: Incógnitas = 8 ($N^1_{NH_3}$, N^2_{Aire}, N^3_{NO}, $N^3_{H_2O}$, $N^3_{O_2}$, $N^3_{N_2}$, r_1, r_2)

Ecuaciones = 5 (balances) + 2 (R_1, R_2)

G de L = 1

Reactor 2: Incógnitas = 9 (N^3_{NO}, $N^3_{H_2O}$, $N^3_{O_2}$, $N^3_{N_2}$, $N^4_{NO_2}$, $N^4_{H_2O}$, $N^4_{O_2}$, $N^4_{N_2}$, r_3)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 4

Absorbedor: Incógnitas = 9 ($N^4_{NO_2}$, $N^4_{H_2O}$, $N^4_{O_2}$, $N^4_{N_2}$, $N^5_{H_2O}$, N^6, $x^6_{O_2}$, N^7, r_4)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 4

Global: Incógnitas = 10 ($N^1_{NH_3}$, N^2_{Aire}, $N^5_{H_2O}$, N^6, $x^6_{O_2}$, N^7, r_1, r_2, r_3, r_4)

Ecuaciones = 7 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 2

Tabla de Balances:

	Reactor 1	**Reactor 2**	**Absorbedor**	**Proceso**	**Global**
NH_3	1	–	–	1	1
O_2	1	1	1	3	1
NO	1	1	-	2	1
H_2O	1	1	1	3	1
N_2	1	1	1	3	1
NO_2	–	1	1	2	1
HNO_3	–	–	1	1	1
Total	**5**	**5**	**5**	**15**	**7**

Estrategia de Solución:

1. Se toman base de cálculo en Reactor 1 y resolviendo esta unidad se conoce N^3_{NO}, $N^3_{H_2O}$, $N^3_{O_2}$, $N^3_{N_2}$, $N^1_{NH_3}$, N^2_{Aire}, r_1, r_2. Se agotan R_1, R_2 y el balance de NH_3

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Reactor 2: G de L A = 4 – 4 (N^3_{NO}, $N^3_{H_2O}$, $N^3_{O_2}$, $N^3_{N_2}$) = 4
   Global: G de L A = 2 – 2($N^1_{NH_3}$, N^2_{Aire}) – 2(r_1, r_2) + 1(R_1) + 1(balance agotado)=0

3. Resolviendo el Reactor 2 se conoce $N^4_{NO_2}$, $N^4_{H_2O}$, $N^4_{O_2}$, $N^4_{N_2}$, r_3 y se agota el balance de NO.

4. Reconfirmando Grados de libertad en global:
   Global: G de L A = $0 - 1(r_3) + 1$ (balance agotado: NO) = 0

5. Resolviendo Global se conoce N^6, $N^5_{H_2O}$, $x^6_{O_2}$, N^7 y se agotan los balances de HNO_3, O_2, N_2,H_2O, NO_2.

6. Se comprueban los resultados en el balance del Absorbedor.

CÁLCULOS:

Balances en el Reactor 1:

Base de cálculo: **Sea $N^1_{NH_3} = 100$**

De R_1: $N^2_{Aire} = 10\, N^1_{NH_3} = 1000$

De R_2: $N^3_{NO} = 0.95\, N^1_{NH_3} = 95$

NO: $95 = 0 + 4\, r_1$

$$\mathbf{r_1 = 23.75}$$

NH_3: $0 = 100 - 4 \times 23.75 - 2\, r_2$

$$\mathbf{r_2 = 2.5}$$

O_2: $N^3_{O_2} = 0.21 \times 1000 - 5 \times 23.75 - 1.5 \times 2.5$

$$\mathbf{N^3_{O_2} = 87.5}$$

H_2O: $N^3_{H_2O} = 0 + 6 \times 23.75 + 3 \times 2.5$

$$\mathbf{N^3_{H_2O} = 150}$$

N_2: $N^3_{N_2} = 0.79 \times 1000 + 2.5$

$$\mathbf{N^3_{N_2} = 792.5}$$

Comprobando los resultados en el balance másico total:

ENTRADA					SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**			**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
					NO	95.0	2850
NH_3	100	1700			H_2O	150.0	2700
O_2	210	6720	→	Reactor 1	O_2	87.5	2800
N_2	790	22120			N_2	792.5	22190
Total		**30540**			**Total**		**30540**

Balances en el Reactor 2:

NO: $0 = 95 - r_3$

$$\mathbf{r_3 = 95}$$

H_2O: $\mathbf{N^4_{H_2O} = 150}$

O_2: $N^4_{O_2} = 87.5 - 0.5 \times 95$

$$\mathbf{N^4_{O_2} = 40}$$

N_2: $\mathbf{N^4_{N_2} = 792.5}$

NO_2: $\mathbf{N^4_{NO_2} = 95}$

Comprobando los resultados en el balance másico total:

ENTRADA					SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**			**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
NO	95.0	2850	→	→	NO_2	95.0	4370
H_2O	150.0	2700	→	→	H_2O	150.0	2700
O_2	87.5	2800	→	→	O_2	40.0	1280
N_2	792.5	22190		→	N_2	792.5	22190
Total		**30540**			**Total**		**30540**

Reactor 2

Balances Globales:

O_2: $x_{O_2}^{6} N^{6} = 0.21 \times 1000 - 5 \times 23.75 - 1.5 \times 2.5 - 0.5 \times 95 - 0.5\, r_4$

H_2O: $0.1\, N^{6} + 0.4\, N^{7} = N_{H_2O}^{5} + 6 \times 23.75 + 3 \times 2.5 - r_4$

N_2: $(1 - 0.005 - 0.1 - x_{O_2}^{6})\, N^{6} = 0.79 \times 1000 + 2.5$

NO_2: $0.005\, N^{6} = 0 + 95 - 2\, r_4$

HNO_3: $0.6\, N^{7} = 0 + 2\, r_4$

Resolviendo el sistema de 5 ecuaciones con 5 incógnitas, tenemos que:

$$\mathbf{N^{6} = 904.8951} \qquad \mathbf{N^{7} = 150.7925} \qquad \mathbf{r_4 = 45.2378}$$

$$\mathbf{x_{O_2}^{6} = 0.0192} \qquad \mathbf{N_{H_2O}^{5} = 46.0443}$$

Comprobando los resultados con un balance másico total en el Absorbedor:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
NO_2	95.0000	4370.0000
H_2O	196.0443	3528.7974
O_2	40.0000	1280.0000
N_2	792.5000	22190.0000
Total		**31368.7974**

SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
NO_2	4.52450	208.1270
H_2O	150.80650	2714.5170
O_2	17.38115	556.1970
N_2	792.5	22190
N_2	90.47550	5699.9565
Total		**31368.7975**

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Reactor 1:

Base de cálculo: **Sea $N^1_{NH_3} = 100$**

De R_1: $$N^2_{Aire} = 10\, N^1_{NH_3} \quad (1)$$

De R_2: $$N^3_{NO} = 0.95\, N^1_{NH_3} \quad (2)$$

NO: $$N^3_{NO} = 0 + 4\, r_1 \quad (3)$$

NH_3: $$0 = N^1_{NH_3} - 4\, r_1 - 2\, r_2 \quad (4)$$

O_2: $$N^3_{O_2} = 0.21 \times N^2_{Aire} - 5 \times r_1 - 1.5 \times r_2 \quad (5)$$

H_2O: $$N^3_{H_2O} = 0 + 6\, r_1 + 3\, r_2 \quad (6)$$

N_2: $$N^3_{N_2} = 0.79 \times N^2_{Aire} + r_2 \quad (7)$$

Reactor 2:

NO: $0 = N^3_{NO} - r_3$ (8)

H_2O: $N^4_{H_2O} = N^3_{H_2O}$ (9)

O_2: $N^4_{O_2} = N^3_{O_2} - 0.5 \times r_3$ (10)

N_2: $N^4_{N_2} = N^3_{N_2}$ (11)

NO_2: $N^4_{NO_2} = r_3$ (12)

Globales:

O_2: $x^6_{O_2} N^6 = 0.21 \times N^2_{Aire} - 5\, r_1 - 1.5\, r_2 - 0.5\, r_3 - 0.5\, r_4$ (13)

H_2O: $0.1\, N^6 + 0.4\, N^7 = N^5_{H_2O} + 6\, r_1 + 3\, r_2 - r_4$ (14)

N_2: $(1 - 0.005 - 0.1 - x^6_{O_2})\, N^6 = 0.79 \times N^2_{Aire} + r_2$ (15)

NO_2: $0.005\, N^6 = 0 + r_3 - 2\, r_4$ (16)

HNO_3: $0.6\, N^7 = 0 + 2\, r_4$ (17)

Resolviendo el sistema de 17 ecuaciones con 17 incógnitas, tendremos:

$N^2_{Aire} = 1000$
$N^3_{H_2O} = 150$
$N^3_{N_2} = 792.5$
$N^3_{NO} = 95$
$N^3_{O_2} = 87.5$
$N^4_{H_2O} = 150$
$N^4_{N_2} = 792.5$
$N^4_{NO_2} = 95$
$N^4_{O_2} = 40$
$N^5_{H_2O} = 46.04428904$
$N^6 = 904.8951049$
$N^7 = 150.79254079$
$r_1 = 23.75$
$r_2 = 2.5$
$r_3 = 95$
$r_4 = 45.23776224$
$x^6_{O_2} = 0.01920788$

3.30. En un nuevo proceso secreto, se hace reaccionar HD_3A_4B con AD, para producir los compuestos principales A_2B y A_3D_3 mediante la reacción:

$$HD_3A_4B + AD \longleftrightarrow A_2B + A_3D_3 + HD$$

Desafortunadamente ocurren dos reacciones paralelas:

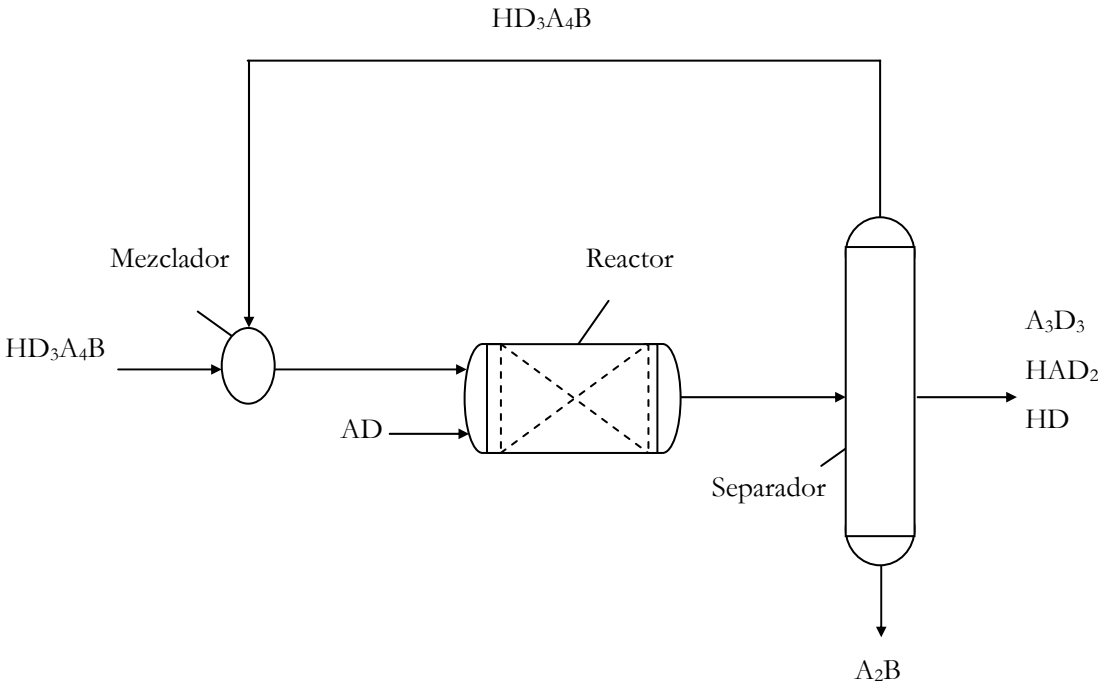
$$HD_3A_4B + 2\ AD \longleftrightarrow HAD_2 + A_2B + A_3D_3$$

$$HD + AD \longleftrightarrow HAD_2$$

Para obtener el producto indeseable HAD_2.

Se desea limitar a 15 % en base molar el HAD_2 en la corriente de producto A_3D_3, debido a la dificultad de separación de HAD_2 de A_3D_3.

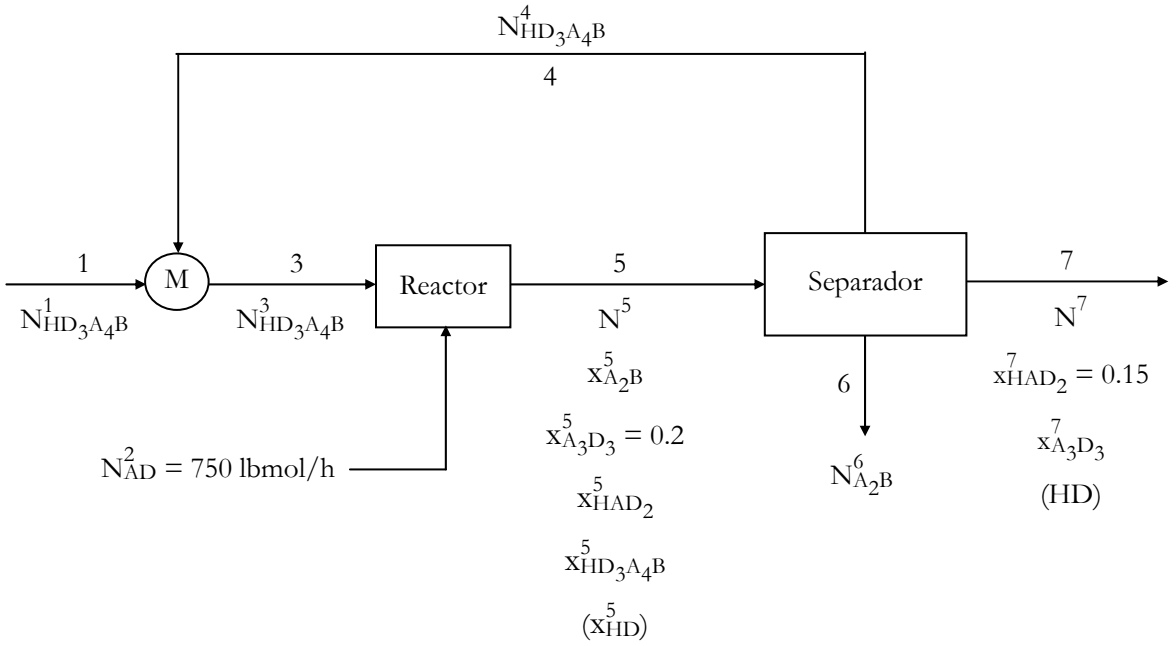
La corriente que sale del reactor contiene 20 % de A_3D_3 en base molar.



Calcule las velocidades de producción de A_2B y A_3D_3 y el flujo de alimentación de HD_3A_4B fresco, si el flujo de alimentación de AD es de 750 lbmol/h y el AD reacciona completamente.

SOLUCIÓN

Diagrama cuantitativo:



Debe analizarse si las tres reacciones son independientes, mediante el procedimiento de reducción del arreglo:

HD_3A_4B	– 1	– 1	0		1	0	1	1	0	0
AD	– 1	– 2	– 1		1	– 1	0	0	1	0
A_2B	1	1	0		– 1	0	– 1	– 1	0	0
A_3D_3	1	1	0		– 1	0	– 1	– 1	0	0
HD	1	0	– 1		– 1	– 1	– 2	– 2	1	0
HAD_2	0	1	1		0	1	1	1	– 1	0

Pudiendo concluirse que sólo hay dos reacciones independientes en el proceso.

El cambio químico puede representarse por medio de las dos reacciones siguientes, construidas a partir de los coeficientes del arreglo reducido:

$$A_2B + A_3D_3 + 2\ HD \longrightarrow HD_3A_4B + HAD_2$$

$$HAD_2 \longrightarrow HD + AD$$

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	**Reactor**	**Separador**	**Proceso**	**Global**
NVI	3	7 + 2	10	13 + 2	6 + 2
NBMI	1	6	5	12	6
NFC	0	1	0	1	1
NCC	0	1	2	2	1
G de L	**2**	**1**	**3**	**0**	**0**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 3 ($N^{1}_{HD_3A_4B}$, $N^{3}_{HD_3A_4B}$, $N^{4}_{HD_3A_4B}$)

Ecuaciones = 1 (balance)

G de L = 2

Reactor: Incógnitas = 7 ($N^{3}_{HD_3A_4B}$, N^{5}, $x^{5}_{A_2B}$, $x^{5}_{HAD_2}$, $x^{5}_{HD_3A_4B}$, r_1, r_2)

Ecuaciones = 6 (balances)

G de L = 1

Separador: Incógnitas = 8 ($N^{4}_{HD_3A_4B}$, N^{5}, $x^{5}_{A_2B}$, $x^{5}_{HAD_2}$, $x^{5}_{HD_3A_4B}$, $N^{6}_{A_2B}$, N^{7}, $x^{7}_{A_3D_3}$)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 3

Global: Incógnitas = 6 ($N^{1}_{HD_3A_4B}$, $N^{6}_{A_2B}$, N^{7}, $x^{7}_{A_3D_3}$, r_1, r_2)

Ecuaciones = 6 (balances)

G de L = 0

Tabla de Balances:

	Mezclador	Reactor	Separador	Proceso	Global
HD_3A_4B	1	1	1	3	1
AD	–	1	–	1	1
A_2B	–	1	1	2	1
A_3D_3	–	1	1	2	1
HD	–	1	1	2	1
HAD_2	–	1	1	2	1
Total	**1**	**6**	**5**	**12**	**6**

Estrategia de Solución:

1. Resolviendo Globales se obtiene: $N^{1}_{HD_3A_4B}$, N^{7}, $x^{7}_{A_3D_3}$ $N^{6}_{A_2B,}$ r_1, r_2 y se agota el balance de AD.

2. Actualizando grados de libertad se encuentra que:
   Mezclador: G de L A = $2 - 1\ (N^{1}_{HD_3A_4B}) = 1$
   Separador: G de L A = $3 - 2\ (N^{6}_{A_2B}, N^{7}) - 1\ (x^{7}_{A_3D_3}) = 0$
   Reactor: G de L A = $1 - 2\ (r_1, r_2) + 1$ (balance agotado: AD) $= 0$

3. Resolviendo el Reactor se obtiene: $N^{3}_{HD_3A_4B,}$ N^{5}, $x^{5}_{A_2B,}$ $x^{5}_{HAD_2}$, $x^{5}_{HD_3A_4B}$ y se agotan los balances de A_2B, A_3D_3, HD, HAD_2.

4. Reconfirmando grados de libertad en el Separador:
   Separador: G de L A = $0 - 1\ (N^{5}) - 3\ (x^{5}_{A_2B,}\ x^{5}_{HAD_2}, x^{5}_{HD_3A_4B} + 4$ (balances agotados) $= 0$

5. Se resuelve el Separador y se comprueban los resultados en el Mezclador.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

AD: $0 = 750 + r_2$

$$\mathbf{r_2 = -750}$$

A_2B: $N^{6}_{A_2B} = 0 - r_1$ (1)

HAD_2: $0.15\ N^{7} = 0 + r_1 + 750$ (2)

HD_3A_4B: $0 = N^{1}_{HD_3A_4B} + r_1$ (3)

A_3D_3: $x^{7}_{A_3D_3} N^{7} = 0 - r_1$ (4)

HD: $(1 - 0.15 - x^{7}_{A_3D_3}) N^{7} = -750 - 2 r_1$ (5)

Resolviendo el sistema de 5 ecuaciones tenemos:

$$\mathbf{N^{6}_{A_2B} = 576.923} \qquad \mathbf{r_1 = -576.923} \qquad \mathbf{x^{7}_{A_3D_3} = 0.5}$$

$$\mathbf{N^{7} = 1153.846} \qquad \mathbf{N^{1}_{HD_3A_4B} = 576.923}$$

Por diferencia tenemos: $\mathbf{x^{7}_{HD} = 0.35}$

Balances en el Reactor:

A_3D_3: $0.2\, N^{5} = 0 + 576.923$

$$\mathbf{N^{5} = 2884.615}$$

A_2B: $x^{5}_{A_2B} \times 2884.615 = 0 + 576.923$

$$\mathbf{x^{5}_{A_2B} = 0.2}$$

HAD_2: $x^{5}_{HAD_2} \times 2884.615 = -576.923 + 750$

$$\mathbf{x^{5}_{HAD_2} = 0.06}$$

HD: $(0.54 - x^{5}_{HD_3A_4B}) \times 2884.615 = 0 + 2\,(576.923) - 750$

$$\mathbf{x^{5}_{HD_3A_4B} = 0.4}$$

HD_3A_4B: $0.4 \times 2884.615 = N^3_{HD_3A_4B} - 576.923$

$$\mathbf{N^3_{HD_3A_4B} = 1730.769}$$

Balances en el Separador:

HD_3A_4B: $x^5_{HD_3A_4B} N^5 = N^4_{HD_3A_4B}$

$$\mathbf{N^4_{HD_3A_4B} = 1153.846}$$

Comprobando los balances en el Mezclador:

$$N^4_{HD_3A_4B} + N^1_{HD_3A_4B} = N^3_{HD_3A_4B}$$

$$576.923 + 576.923 = 1153.846$$

$$1153.846 = 1153.846$$

ECUACIONES DEL PROCESO:

Resolviendo el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX:

Globales:

AD: $0 = 750 + r_2$ (1)

A_2B: $N^6_{A_2B} = 0 - r_1$ (2)

HAD_2: $0.15\, N^7 = 0 + r_1 - r_2$ (3)

HD_3A_4B: $0 = N^1_{HD_3A_4B} + r_1$ (4)

A_3D_3: $x^7_{A_3D_3} N^7 = 0 - r_1$ (5)

HD: $(1 - 0.15 - x^7_{A_3D_3}) N^7 = r_2 - 2\, r_1$ (6)

Reactor:

A_3D_3: $$0.2\ N^5 = 0 - r_1 \quad (7)$$

A_2B: $$x^5_{A_2B}\ N^5 = 0 - r_1 \quad (8)$$

HAD_2: $$x^5_{HAD_2}\ N^5 = r_1 - r_2 \quad (9)$$

HD: $$(0.8 - x^5_{A_2B} - x^5_{HAD_2} - x^5_{HD_3A_4B})\ N^5 = -2\ r_1 + r_2 \quad (10)$$

HD_3A_4B: $$x^5_{HD_3A_4B}\ N^5 = N^3_{HD_3A_4B} + r_1 \quad (11)$$

Separador:

HD_3A_4B: $$x^5_{HD_3A_4B}\ N^5 = N^4_{HD_3A_4B} \quad (12)$$

Resolviendo el sistema de 12 ecuaciones con 12 incógnitas:

$N^1_{HD_3A_4B} = 576.923077$

$N^3_{HD_3A_4B} = 1730.769231$

$N^4_{HD_3A_4B} = 1153.846154$

$N^5 = 2884.615385$

$N^6_{A_2B} = 576.923077$

$N^7 = 1153.846154$

$r_1 = -576.923077$

$r_2 = -750$

$x^5_{A_2B} = 0.2$

$x^5_{HAD_2} = 0.06$

$x^5_{HD_3A_4B} = 0.4$

$x^7_{A_3D_3} = 0.5$

3.31. La cianamida de calcio puede producirse a partir de piedra caliza ($CaCO_3$), coque y nitrógeno, usando los pasos de proceso presentados en el diagrama de flujo de la figura:

En el horno se descompone térmicamente 90 % del $CaCO_3$ alimentado, según la reacción:

$$\mathbf{CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2}$$

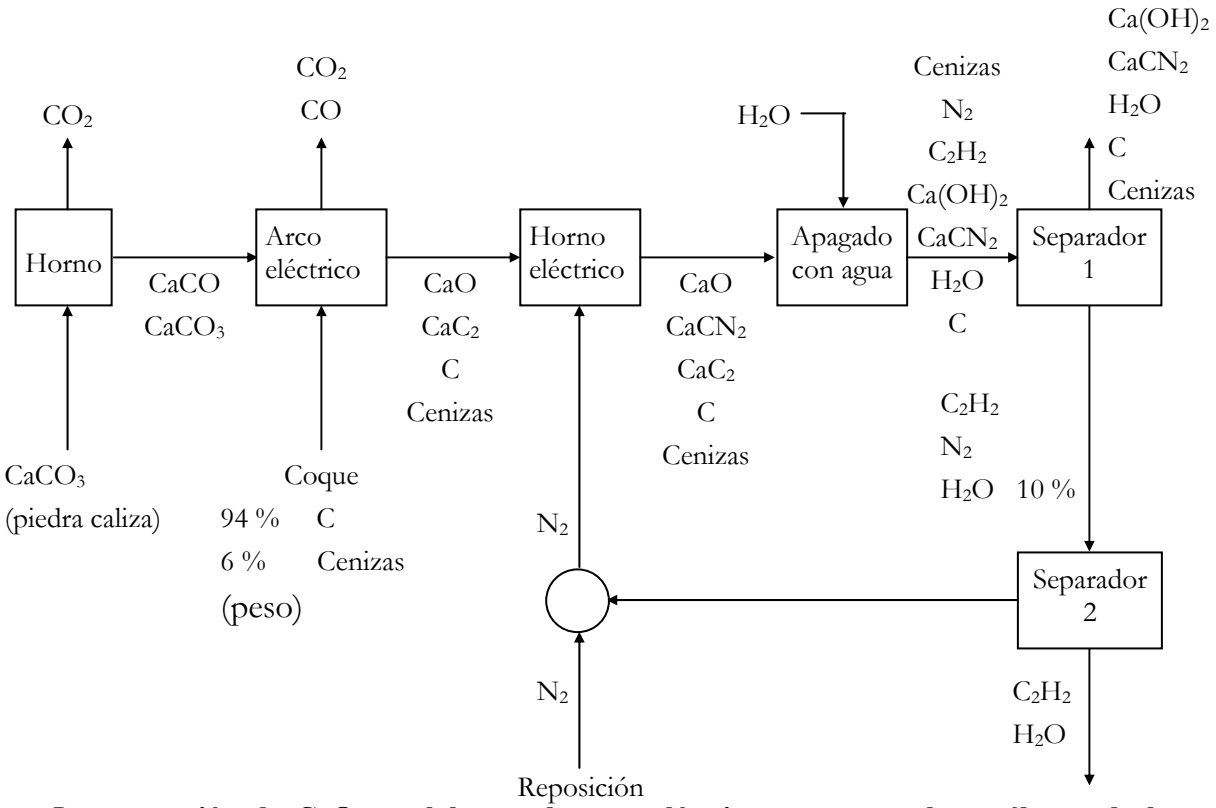
El CO_2 se elimina y el material restante se envía a un horno de arco eléctrico, en donde se hace reaccionar con carbón para producir CaC_2:

$$\mathbf{CaO + 3\ C \longrightarrow CaC_2 + CO}$$

En este punto el $CaCO_3$ restante se descompone completamente para producir CaO adicional:

$$CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2$$

El flujo de alimentación de coque se ajusta de manera que la cantidad de C alimentada sea igual a la cantidad estequiométricamente necesaria para hacer reaccionar todo el CaO disponible.



La conversión de CaO en el horno de arco eléctrico no es completa, sólo puede lograrse alrededor del 90 %.

Los subproductos gaseosos CO_2 y CO se separan y los demás materiales (CaC_2, CaO, carbón y cenizas residuales) se transfieren a un horno eléctrico, en donde el CaC_2 reacciona con nitrógeno para producir cianamida:

$$CaC_2 + N_2 \longrightarrow CaCN_2 + C$$

La conversión de CaC_2 es de 80 %, siempre que se use un exceso de N_2 (el triple del requerimiento estequiométrico).

Los productos combinados de la reacción se enfrían posteriormente con un exceso de agua.

En ésta última operación, el CaC_2 y el CaO que no reaccionaron se convierten completamente a hidróxido:

$$CaC_2 + 2\ H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2 + C_2H_2$$

$$CaO + H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2$$

De la corriente de salida de la operación anterior se separan sus componentes gaseosos (N_2, C_2H_2 y un poco de vapor de agua).

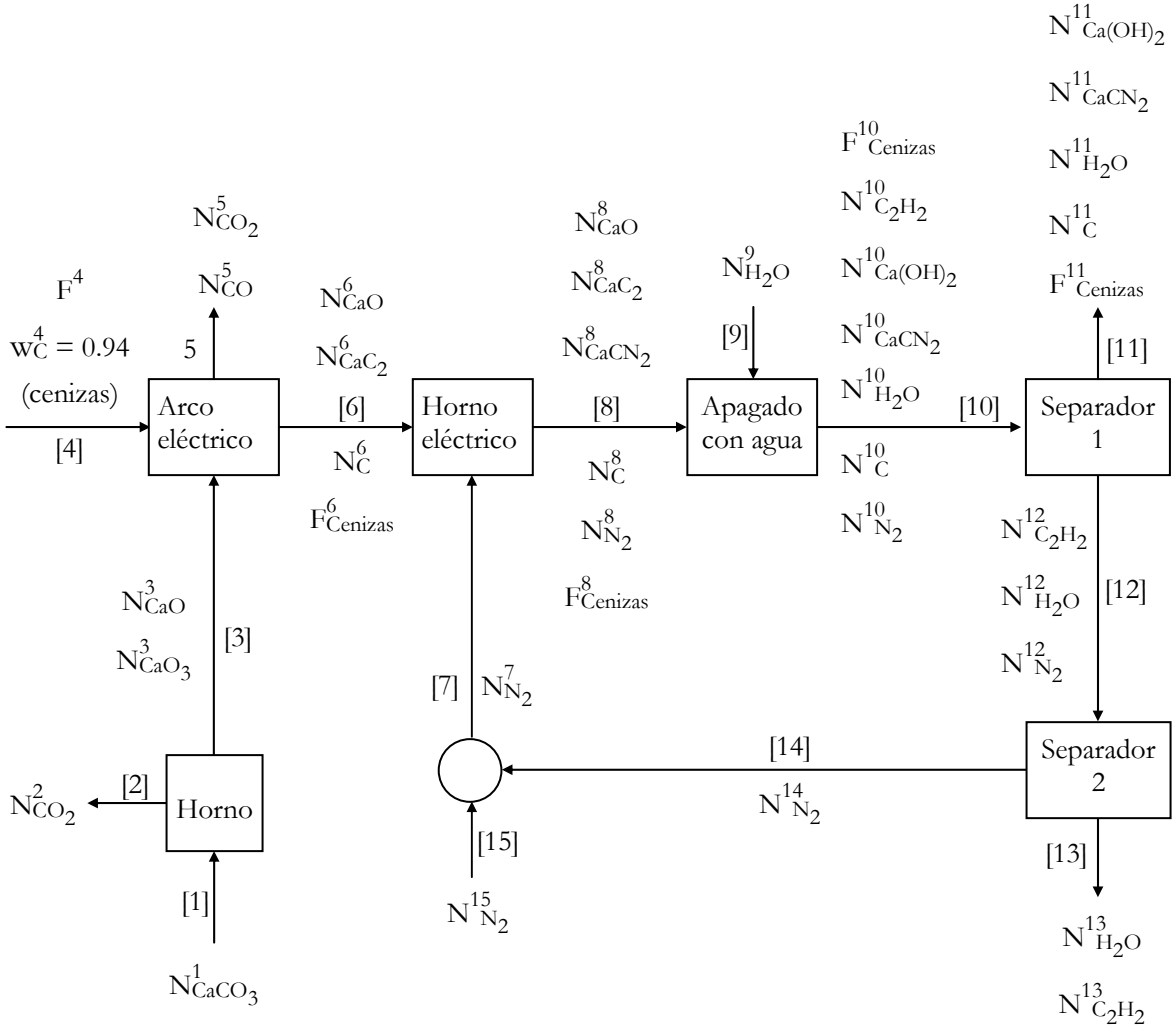
Estos componentes gaseosos se separan posteriormente para obtener N_2 purificado, que se recirculan de regreso al horno eléctrico.

a. Efectúe el análisis de Grados de Libertad, para demostrar que el proceso está sub-especificado.

b. Realice los cálculos de balance hasta donde sea posible. ¿En qué punto ya no fue suficiente la información especificada?

¿Cuánta información adicional sería necesaria?

SOLUCIÓN:
Diagrama cuantitativo:



Las reacciones son:

$$CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2 \qquad r_1$$

$$CaO + 3\ C \longrightarrow CaC_2 + CO \qquad r_2$$

$$CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2 \qquad r_3$$

$$CaC_2 + N_2 \longrightarrow CaCN_2 + C \qquad r_4$$

$$CaC_2 + 2\ H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2 + C_2H_2 \qquad r_5$$

$$CaO + H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2 \qquad r_6$$

Relaciones:

R_1: $0.1\ N^1_{CaCO_3} = N^3_{CaCO_3}$

R_2: $w^4_C\ F^4 = 3\ N^3_{CaCO}$

R_3: $N^6_{CaO} = 0.1\ N^3_{CaO}$

R_4: $N^8_{CaC_2} = 0.2\ N^6_{CaC_2}$

R_5: $N^7_{N_2} = 3\ N^6_{CaC_2}$

a. Efectúe el análisis de Grados de Libertad, para demostrar que el proceso está sub-especificado.

Tabla de Grados de Libertad:

	Horno	**Arco**	**Horno**	**Apagado**
NVI	4 + 1	10 + 2	11 + 1	14 + 2
NBMI	3	7	6	9
NCC	0	1	0	0
NRC R_1	1	–	–	–
R_2	–	1	–	–
R_3	–	1	–	–
R_4	–	–	1	–
R_5	–	–	1	–
G de L	**1**	**2**	**4**	**7**

	Separad. 1	Separad. 2	Mezclador	Proceso	Global
NVI	15	6	3	39 + 6	15 + 5
NBMI	7	3	1	36	12
NCC	0	0	0	2	1
NRC R_1	–	–	–	1	–
R_2	–	–	–	1	–
R_3	–	–	–	1	–
R_4	–	–	–	1	–
R_5	–	–	–	1	–
G de L	**8**	**3**	**2**	**2**	**7**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Horno: Incógnitas = 5 ($N^{1}_{CaCO_3}$, $N^{2}_{CO_2}$, N^{3}_{CaO}, $N^{3}_{CaCO_3}$, r_1)

Ecuaciones = 3 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 1

Arco eléctrico: Incógnitas = 11 (N^{3}_{CaO}, $N^{3}_{CaCO_3}$, F^{4}, $N^{5}_{CO_2}$, N^{5}_{CO}, N^{6}_{CaO}, $N^{6}_{CaC_2}$, N^{6}_{C}, $N^{6}_{Cenizas}$, r_2, r_3)

Ecuaciones = 7 (balances) + 2 (R_2, R_3)

G de L = 2

Horno eléctrico: Incógnitas = 12 (N^{6}_{CaO}, $N^{6}_{CaC_2}$, N^{6}_{C}, $N^{6}_{Cenizas}$, $N^{7}_{N_2}$, N^{8}_{CaO}, $N^{8}_{CaC_2}$, $N^{8}_{CaCN_2}$, N^{8}_{C}, $N^{8}_{N_2}$, $N^{8}_{Cenizas}$, r_4)

Ecuaciones = 6 (balances) + 2 (R_4, R_5)

G de L = 4

Apagado: Incógnitas = 16 (N^{8}_{CaO}, $N^{8}_{CaC_2}$, $N^{8}_{CaCN_2}$, N^{8}_{C}, $N^{8}_{N_2}$, $N^{8}_{Cenizas}$, $N^{9}_{H_2O}$, $N^{10}_{Cenizas}$, $N^{10}_{C_2H_2}$, $N^{10}_{Ca(OH)_2}$, $N^{10}_{CaCN_2}$, $N^{10}_{H_2O}$, N^{10}_{C}, $N^{10}_{N_2}$, r_5, r_6)

Ecuaciones = 9 (balances)

G de L = 7

Separador 1: Incógnitas = 15 ($N^{10}_{Cenizas}$, $N^{10}_{C_2H_2}$, $N^{10}_{Ca(OH)_2}$, $N^{10}_{CaCN_2}$, $N^{10}_{H_2O}$, N^{10}_{C}, $N^{10}_{N_2}$, N^{11}_{C}, $N^{11}_{Ca(OH)_2}$, $N^{11}_{CaCN_2}$, $N^{11}_{H_2O}$, $N^{11}_{Cenizas}$, $N^{12}_{C_2H_2}$, $N^{12}_{N_2}$, $N^{12}_{H_2O}$)

Ecuaciones = 7 (balances)

G de L = 8

Separador 2: Incógnitas = 6 ($N^{12}_{C_2H_2}$, $N^{12}_{N_2}$, $N^{12}_{H_2O}$, $N^{13}_{H_2O}$, $N^{13}_{C_2H_2}$, $N^{14}_{N_2}$)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 3

Mezclador: Incógnitas = 3 ($N^{7}_{N_2}$, $N^{14}_{N_2}$, $N^{15}_{N_2}$)

Ecuaciones = 1 (balances)

G de L = 2

Global: Incógnitas = 19 ($N^{1}_{CaCO_3}$, $N^{2}_{CO_2}$, F^{4}, $N^{5}_{CO_2}$, N^{5}_{CO}, $N^{9}_{H_2O}$, $N^{11}_{Ca(OH)_2}$, $N^{11}_{CaCN_2}$, $N^{11}_{H_2O}$, N^{11}_{C}, $N^{11}_{Cenizas}$, $N^{13}_{H_2O}$, $N^{13}_{C_2H_2}$, $N^{15}_{N_2}$, r_1', r_2, r_4, r_5 , r_6)

Ecuaciones = 12 (balances)

G de L = 7

El proceso tiene 2 Grados de Libertad.

Al tomar una Base de Cálculo quedaría con un Grado de Libertad o sea que se encuentra Sub - especificado.

No puede resolverse **completamente** el problema.

Como el Horno tiene 1 grado de libertad, puede tomarse ahí la Base de Cálculo y la Estrategia de Solución informará hasta dónde puede resolverse el problema.

b. Realice los cálculos de balance hasta donde sea posible.

¿En qué punto ya no fue suficiente la información especificada?

¿Cuánta información adicional sería necesaria?

Tabla de Balances:

	Horno	**Arco eléctrico**	**Horno eléctrico**	**Apagado**	**Separador 1**	**Separador 2**	**Mezclador**	**Proceso**	**Global**
CaO	1	1	1	1	–	–	–	4	1
CaC_2	–	1	1	1	–	–	–	3	1
$CaCN_2$	–	–	1	1	1	–	–	3	1
$CaCO_3$	1	1	–	–	–	–	–	2	1
$Ca(OH)_2$	–	–	–	1	1	–	–	2	1
C	–	1	1	1	1	–	–	4	1
C_2H_2	–	–	–	1	1	1	–	3	1
CO	–	1	–	–	–	–	–	1	1
CO_2	1	1	–	–	–	–	–	2	1
Cenizas	–	1	1	1	1	–	–	4	1
N_2	–	–	1	1	1	1	1	5	1
H_2O	–	–	–	1	1	1	–	3	1
Total	**3**	**7**	**6**	**9**	**7**	**3**	**1**	**36**	**12**

Estrategia de Solución:

1. Tomando Base de Cálculo en el Horno y resolviéndolo se obtiene: $N^1_{CaCO_3}$, $N^2_{CO_2}$, N^3_{CaO}, $N^3_{CaCO_3}$ y r_1 .Se agota R_1.

2. Actualizando los Grados de Libertad:
   Arco eléctrico: G de L A = 2 – 2 (N^3_{CaO}, $N^3_{CaCO_3}$) = 0
   Globales: G de L A = 7 – 2 ($N^1_{CaCO_3}$, $N^2_{CO_2}$) – 1 (r_1) = 4

3. Resolviendo el Arco eléctrico se obtiene: F^4, $N^5_{CO_2}$, N^5_{CO}, N^6_{CaO}, $N^6_{CaC_2}$, N^6_C, $F^6_{Cenizas}$, r_2 y r_3. Se agotan R_2, R_3 y los balances de $CaCO_3$, CO_2 y CO.

4. Actualizando los Grados de Libertad:
   Globales: G de L A = 5 – 3 (F^4, $N^5_{CO_2}$, N^5_{CO}) – 2 (r_2, r_3) + 3 (balances agotados) = 3
   Horno eléctrico: G de L A = 4 – 4 (N^6_{CaO}, $N^6_{CaC_2}$, N^6_C, $F^6_{Cenizas}$) = 0

5. Resolviendo el Horno eléctrico se obtiene: $N^7_{N_2}$, N^8_{CaO}, $N^8_{CaC_2}$, $N^8_{CaCN_2}$, N^8_C, $N^8_{N_2}$, $F^8_{Cenizas}$ y r_4. Se agotan R_4 y R_5.

6. Actualizando los Grados de Libertad:
   Apagado: G de L A = 7 – 6 (N^8_{CaO}, $N^8_{CaC_2}$, $N^8_{CaCN_2}$, N^8_C, $N^8_{N_2}$, $F^8_{Cenizas}$) = 1
   Mezclador: G de L A = 2 – 6 ($N^7_{N_2}$) = 1
   Global: G de L A = 3 – 1 (r_4) = 1

Como ninguna unidad queda con cero Grado de Libertad, no puede resolverse ninguna de ellas o lo que es lo mismo, todas las variables quedarían en función de una de ellas (Un grado de libertad significa un número de incógnita mayor en 1 al número de ecuaciones).

El balance podría realizarse completamente si se conociera, el flujo de la corriente 9 o el de la corriente 15.

CÁLCULOS:

Balances en el Horno:

Base de Cálculo: $\mathbf{N^1_{CaCO_3} = 100}$

De R_1: $N^3_{CaCO_3} = 0.1 \times 100 = 10$

$CaCO_3$: $10 = 100 - r_1$

$\mathbf{r_1 = 90}$

CaO: $N^3_{CaO} = 0 + r_1$

$\mathbf{N^3_{CaO} = 90}$

CO_2: $N^2_{CO_2} = 0 + r_1$

$\mathbf{N^2_{CO_2} = 90}$

Balances en el Arco eléctrico:

De R_2: $0.94\ F^4 = 3 \times 90 \times 12$

$$\mathbf{F^4 = 3446.81}$$

De R_3: $N^6_{CaO*} = 0.1 \times 90$

$$\mathbf{N^6_{CaO*} = 9}$$

CaO: $9 = 90 - r_2$

$$\mathbf{r_2 = 81}$$

CaC_2: $\mathbf{N^6_{CaC} = 81}$

$CaCO_3$: $0 = 10 - r_3$ $\mathbf{r_3 = 10}$

$$N^6_{CaO} = N^6_{CaO*} + r_3 = 9 + 10 = 19$$

$$\mathbf{N^6_{CaO} = 19}$$

C: $N^6_C = \dfrac{0.94 \times 3446.81}{12} - 3\ r_2$

$$\mathbf{N^6_C = 27}$$

CO_2: $\mathbf{N^5_{CO_2} = 10}$

CO: $\mathbf{N^5_{CO} = 81}$

Cenizas: $F^6_{Cenizas} = 0.06 \times 3446.81$

$$\mathbf{F^6_{Cenizas} = 206.81}$$

Balances en el Horno eléctrico:

De R_4: $N^8_{CaC_2} = 0.2 \times 81$

$$\mathbf{N^8_{CaC_2} = 16.2}$$

De R_5: $N^7_{N_2} = 3 \times 81$

$$\mathbf{N^7_{N_2} = 243}$$

CaC_2: $16.2 = 81 - r_4$

$$\mathbf{r_4 = 64.8}$$

$CaCN_2$: $\mathbf{N^8_{CaCN_2} = 64.8}$

CaO: $\mathbf{N^8_{CaO} = 19}$

N_2: $N^8_{N_2} = 243 - 64.8$

$$\mathbf{N^8_{N_2} = 178.2}$$

C: $N^8_C = 27 + 64.8$

$$\mathbf{N^8_C = 91.8}$$

Cenizas: $\mathbf{F^8_{Cenizas} = 206.81}$

Para resolver el problema utilizando el Programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX se plantean las ecuaciones de balances en el orden dado por la Estrategia de Solución:

Horno:

Base de Cálculo: $\mathbf{N^1_{CaCO_3} = 100}$

De R_1: $N^3_{CaCO_3} = 0.1 \times N^1_{CaCO_3}$ (1)

$CaCO_3$: $N^3_{CaCO_3} = N^1_{CaCO_3} - r_1$ (2)

CaO: $N^3_{CaO} = 0 + r_1$ (3)

CO_2: $N^2_{CO_2} = 0 + r_1$ (4)

Arco eléctrico:

De R_2: $0.94 = 3 \times N^3_{CaO} \times 12$ (5)

De R_3: $N^6_{CaO*} = 0.1 \times N^3_{CaO}$ (6)

CaO: $N^6_{CaO*} = N^3_{CaO} - r_2$ (7)

CaC_2: $N^6_{CaC_2} = r_2$ (8)

$CaCO_3$: $0 = N^3_{CaCO_3} - r_3$ (9)

$N^6_{CaO} = N^6_{CaO} + r_3$ (10)

C: $N^6_C = \frac{0.94 \times F^4}{12} - 3\, r_2$ (11)

CO_2: $N^5_{CO_2} = r_3$ (12)

CO: $N^5_{CO} = r_2$ (13)

Cenizas: $F^6_{Cenizas} = 0.06 \times F^4$ (14)

Horno eléctrico:

De R_4: $$N^8_{CaC_2} = 0.2 \times N^6_{CaC_2} \quad (15)$$

De R_5: $$N^7_{N_2} = 3 \times N^6_{CaC_2} \quad (16)$$

CaC_2: $$N^8_{CaC_2} = N^6_{CaC_2} - r_4 \quad (17)$$

$CaCN_2$: $$N^8_{CaCN_2} = r_4 \quad (18)$$

CaO: $$N^8_{CaO} = N^6_{CaO} \quad (19)$$

N_2: $$N^8_{N_2} = N^7_{N_2} - r_4 \quad (20)$$

C: $$N^8_C = N^6_C + r_4 \quad (21)$$

Cenizas: $$F^8_{Cenizas} = F^6_{Cenizas} \quad (22)$$

Resolviendo el sistema de 22 ecuaciones con 22 incógnitas:

$\mathbf{F^4 = 3446.808511}$

$\mathbf{F^6_{Cenizas} = 206.808511}$

$\mathbf{F^8_{Cenizas} = 206.808511}$

$\mathbf{N^2_{CO_2} = 90}$

$\mathbf{N^3_{CaCO_3} = 10}$

$\mathbf{N^3_{CaO} = 90}$

$\mathbf{N^5_{CO} = 81}$

$\mathbf{N^5_{CO_2} = 10}$

$\mathbf{N^6_C = 27}$

$\mathbf{N^6_{CaC_2} = 81}$

$\mathbf{N^6_{CaO} = 19}$

$\mathbf{N^6_{CaO^*} = 9}$

$\mathbf{N^7_{N_2} = 243}$

$\mathbf{N^8_C = 91.8}$

$\mathbf{N^8_{CaC_2} = 16.2}$

$\mathbf{N^8_{CaCN_2} = 64.8}$

$\mathbf{N^8_{CaO} = 19}$

$\mathbf{N^8_{N_2} = 178.2}$

$\mathbf{r_1 = 90}$

$\mathbf{r_2 = 81}$

$\mathbf{r_3 = 10}$

$\mathbf{r_4 = 64.8}$

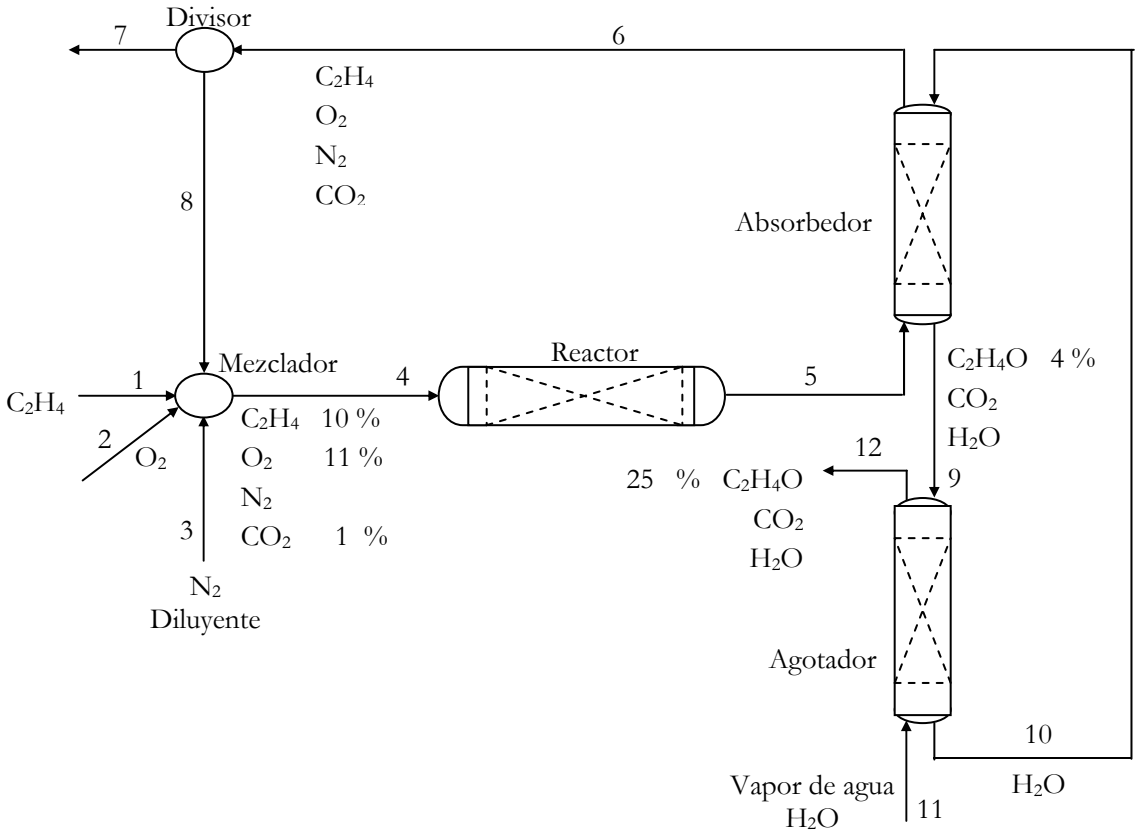
3.32. El óxido de etileno se fabrica por la oxidación parcial de etileno con oxígeno, utilizando un catalizador de plata:

$$2\ C_2H_4 + O_2 \longrightarrow 2\ C_2H_4O$$

también ocurre una reacción paralela indeseable:

$$C_2H_4 + 3\ O_2 \longrightarrow 2\ CO_2 + 2\ H_2O$$

Con una composición de entrada al reactor de 10 % de C_2H_4, 11 % de O_2, 1 % de CO_2 y el resto de inerte diluyente N_2, se observa una conversión de 25 %, y se obtiene una corriente de salida del reactor con 2 moles de CO_2 por mol de H_2O.



El óxido de etileno se elimina de la corriente que sale del reactor mediante un absorbedor. Se observa que los gases de descarga superior del absorbedor contienen 6 moles de C_2H_4 por mol de CO_2. El líquido del absorbedor, que contiene 4 % de C_2H_4O, se envía a un agotador de vapor de agua. El análisis del producto, corriente 12, corresponde a 25 % de C_2H_4O. Parte de los gases del observador se purgan y el resto se recircula al reactor.

a. Construya una tabla de Grados de Libertad, mostrando que el proceso está especificado correctamente.

b. Deduzca un orden de cálculo, suponiendo que se desean determinar todos los flujos y composiciones. Explique.

c. Calcule el N_2 diluyente necesario por mol de C_2H_4 alimentada al proceso.

d. Calcule el rendimiento global de C_2H_4O a partir de C_2H_4 para el proceso.

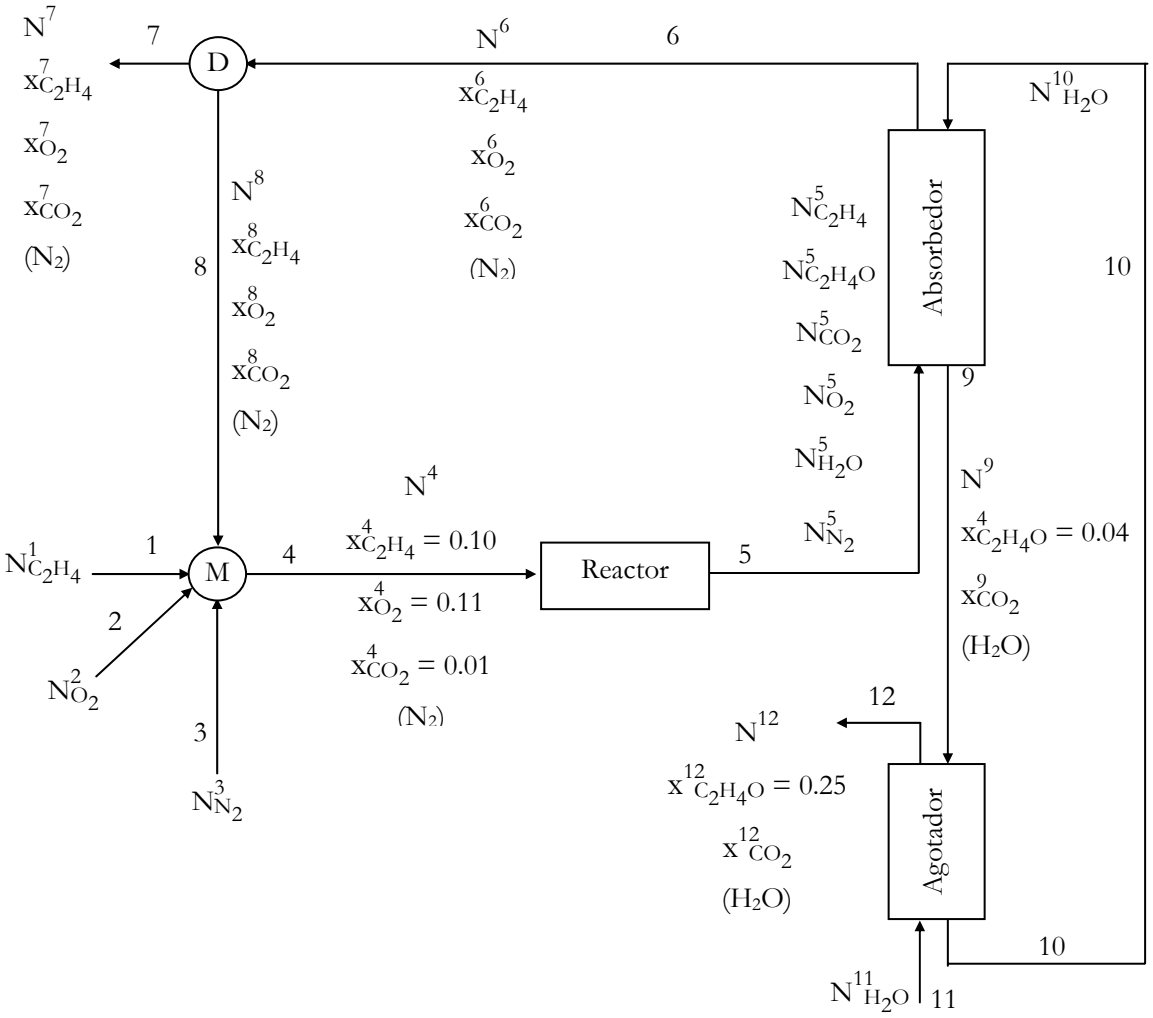
e. Calcule el rendimiento fraccional de C_2H_4O, tal como ocurre en el reactor mismo. Explique por qué son diferentes.

El rendimiento global se define como:

$$\text{Rendimiento global} = \frac{\text{moles de } C_2H_4O \text{ producidas realmente}}{\text{moles de } C_2H_4O \text{ que podrían producirse si todo el } C_2H_4 \text{ alimentado se usara para producir sólo } C_2H_4O}$$

SOLUCIÓN:

Diagrama cuantitativo:



a. Construya una tabla de Grados de Libertad, mostrando que el proceso está especificado correctamente.

Por simple inspección se concluye que las reacciones son independientes.

Relaciones:

R_1: $N^5_{C_2H_4} = 0.75 \times 0.1\, N^4$

R_2: $N^5_{CO_2} = 2\, N^5_{H_2O}$

R_3: $x^6_{C_2H_4} = 6\, x^6_{CO_2}$

R_4: $R_D = (4 - 1)(2 - 1) = 3$

Tabla de Grados de Libertad:

	Mezclador	**Reactor**	**Absorbedor**	**Agotador**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
NVI	11	10 + 2	14	8	12	33 + 2	11 + 2
NBMI	4	6	6	3	4	23	6
NFC	0	0	0	0	0	0	0
NCC	3	3	1	2	0	5	1
NRC R_1	–	1	–	–	–	1	–
R_2	–	1	1	–	–	1	–
R_3	1	–	1	–	1	1	1
R_4	–	–	–	–	3	3	–
G de L	**3**	**1**	**5**	**3**	**4**	**1**	**5**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador: Incógnitas = 8 ($N^1_{C_2H_4}$, $N^2_{O_2}$, $N^3_{N_2}$, N^4, N^8, $x^8_{C_2H_4}$, $x^8_{O_2}$, $x^8_{CO_2}$)

Ecuaciones = 4 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 3

Reactor: Incógnitas = 9 (N^{4}, $N^{5}_{N_2}$, $N^{5}_{C_2H_4}$, $N^{5}_{C_2H_4O}$, $N^{5}_{CO_2}$, $N^{5}_{O_2}$, $N^{5}_{H_2O}$, r_1, r_2)

Ecuaciones = 6 (balances) + 2 (R_1, R_2)

G de L = 1

Absorbedor: Incógnitas = 13 ($N^{5}_{C_2H_4}$, $N^{5}_{C_2H_4O}$, $N^{5}_{CO_2}$, $N^{5}_{O_2}$, $N^{5}_{H_2O}$, $N^{5}_{N_2}$, N^{6}, $x^{6}_{C_2H_4}$, $x^{6}_{O_2}$, $x^{6}_{CO_2}$, N^{9}, $x^{9}_{CO_2}$, $N^{10}_{H_2O}$)

Ecuaciones = 6 (balances) + 2 (R_2, R_3)

G de L = 5

Agotador: Incógnitas = 6 (N^{9}, $x^{9}_{CO_2}$, $N^{10}_{H_2O}$, $N^{11}_{H_2O}$, N^{12}, $x^{12}_{CO_2}$)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 3

Divisor: Incógnitas = 12 (N^{6}, $x^{6}_{C_2H_4}$, $x^{6}_{O_2}$, $x^{6}_{CO_2}$, N^{7}, $x^{7}_{C_2H_4}$, $x^{7}_{O_2}$, $x^{7}_{CO_2}$, N^{8}, $x^{8}_{C_2H_4}$, $x^{8}_{O_2}$, $x^{8}_{CO_2}$)

Ecuaciones = 4 (balances) + 4 (R_3, R_4)

G de L = 4

Global: Incógnitas = 12 ($N^{1}_{C_2H_4}$, $N^{2}_{O_2}$, $N^{3}_{N_2}$, N^{7}, $x^{7}_{C_2H_4}$, $x^{7}_{O_2}$, $x^{7}_{CO_2}$, $N^{11}_{H_2O}$, N^{12}, $x^{12}_{CO_2}$, r_1, r_2)

Ecuaciones = 6 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 5

Al tomar Base de Cálculo en el Reactor, tanto éste como el proceso quedan especificados correctamente.

b. Deduzca un orden de cálculo, suponiendo que se desean determinar todos los flujos y composiciones. Explique.

Tabla de Balances:

	Mezclador	**Reactor**	**Absorbedor**	**Agotador**	**Divisor**	**Proceso**	**Global**
C_2H_4	1	1	1	–	1	4	1
O_2	1	1	1	–	1	4	1
N_2	1	1	1	–	1	4	1
CO_2	1	1	1	1	1	5	1
C_2H_4O	–	1	1	1	–	3	1
H_2O	–	1	1	1	–	3	1
Total	**4**	**6**	**6**	**3**	**4**	**23**	**6**

Estrategia de Solución:

1. Se toma Base de Cálculo en el Reactor. Resolviéndolo se conoce N^5, $x^5_{C_2H_4}$, $x^5_{O_2}$, $x^5_{CO_2}$, $x^5_{H_2O}$, $x^5_{C_2H_4O}$, N^4, r_1, r_2. Se agotan R_1 y R_2.

2. Actualizando los Grados de Libertad:
   Absorbedor: G de L A = 5 – 6 ($N^5_{C_2H_4}$, $N^5_{O_2}$, $N^5_{CO_2}$, $N^5_{H_2O}$, $N^5_{C_2H_4O}$, $N^5_{N_2}$) + 1 (R_2 agotada) = 0
   Mezclador: G de L A = 3 – 1 (N^4) = 4
   Global: G de L A = 5 – 2 (r_1, r_2) = 3

3. Resolviendo el Absorbedor se conoce: N^9, $x^9_{CO_2}$, $N^{10}_{H_2O}$, N^6, $x^6_{C_2H_4}$, $x^6_{CO_2}$, $x^6_{O_2}$. De la condición del Divisor: $x^7_{C_2H_4}$, $x^7_{O_2}$, $x^7_{CO_2}$, $x^8_{C_2H_4}$, $x^8_{O_2}$, $x^8_{CO_2}$.

4. Actualizando los Grados de Libertad:
   Agotador: G de L A = 3 – 2 (N^9, $N^{10}_{H_2O}$) – 1 ($x^9_{CO_2}$) = 0
   Divisor: G de L A = 4 – 1 (N^6) – 3 ($x^6_{C_2H_4}$, $x^6_{CO_2}$, $x^6_{O_2}$) + 1 (R_3 agotada) = 1
   Mezclador: G de L A = 2 – 3 ($x^8_{C_2H_4}$, $x^8_{O_2}$, $x^8_{CO_2}$) + 1 (R_3 agotada) = 0
   Global: G de L A = 3 – 3 ($x^7_{C_2H_4}$, $x^7_{O_2}$, $x^7_{CO_2}$) + 1 (R_3 agotada) = 1

5. Resolviendo el Agotador se conoce: $N^{11}_{H_2O}$, N^{12}, $x^{12}_{CO_2}$. Se agotan los balances de C_2H_4O y H_2O.

6. Reconfirmando los Grados de Libertad del Mezclador:

   Mezclador: G de L R = 0 – 0 = 0

7. Resolviendo el Mezclador se conoce: $N^{1}_{C_2H_4}$, $N^{2}_{O_2}$, $N^{3}_{N_2}$ y N^{8}.

8. Actualizando los Grados de Libertad:
   Global: G de L A = 1 – 5 ($N^{11}_{H_2O}$, N^{12}, $N^{1}_{C_2H_4}$, $N^{2}_{O_2}$, $N^{3}_{N_2}$) – 1 ($x^{12}_{CO_2}$)
   + 2 (balances agotados: C_2H_4O, H_2O) = – 3
   Divisor: G de L A = 1 – 1 (N^{8}) = 0

9. Se resuelve el Divisor y se comprueban los resultados en los Balances Globales.

CÁLCULOS:

Balances en el Reactor:

Base de Cálculo: $\mathbf{N^{4} = 1000}$

De R_1: $$N^{5}_{C_2H_4} = 0.75 \times 0.1 \times 1000$$

$$\mathbf{N^{5}_{C_2H_4} = 75}$$

N_2: $$N^{5}_{N_2} = 0.78 \times 1000$$

$$\mathbf{N^{5}_{N_2} = 780}$$

C_2H_4: $$N^{5}_{C_2H_4} = 0.1 \times 1000 - 2\,r_1 - r_2 \quad (1)$$

CO_2: $$N^{5}_{CO_2} = 0.01 \times 1000 + 2\,r_2 \quad (2)$$

H_2O: $$N^{5}_{H_2O} = 2\,r_2 \quad (3)$$

De R_2: $$N^{5}_{CO_2} = 2\,N^{5}_{H_2O} \quad (4)$$

Resolviendo el sistema se obtienen los siguientes resultados:

$\mathbf{r_1 = 10}$ $\mathbf{r_2 = 5}$

$\mathbf{N^{5}_{CO_2} = 20}$ $\mathbf{N^{5}_{H_2O} = 10}$

Continuando con los Balances:

O_2: $$N_{O_2}^5 = 0.11 \times 1000 - 10 - 3 \times 5$$

$$\mathbf{N_{O_2}^5 = 85}$$

C_2H_4O: $$N_{C_2H_4O}^5 = 2 \times 10 = 20$$

Sumando los flujos de la corriente 5:

$$\mathbf{N^5 = 990}$$

Comprobando los resultados en el Balance de Materia:

ENTRADA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
C_2H_4	100	2800
O_2	110	3520
CO_2	10	440
N_2	780	21840
Total		**28600**

Reactor

SALIDA		
Sustancia	**Moles**	**Masa**
C_2H_4	75	2100
O_2	85	2720
CO_2	20	880
N_2	780	21840
H_2O	10	180
C_2H_4O	20	880
Total		**28600**

Balances en el Absorbedor:

C_2H_4O: $$0.04\ N^9 = 20$$

$$\mathbf{N^9 = 500}$$

CO_2: $$20 = x_{CO_2}^6 N^6 + x_{CO_2}^9 \times 500 \qquad (5)$$

C_2H_4: $$75 = x_{C_2H_4}^6 N^6 \qquad (6)$$

De R_3: $$x^{6}_{C_2H_4} = 6\, x^{6}_{CO_2} \quad (7)$$

H_2O: $$10 + N^{10}_{H_2O} = (1 - 0.04 - x^{9}_{CO_2}) \times 500 \quad (8)$$

Total: $$990 + N^{10}_{H_2O} = N^{6} + 500 \quad (9)$$

Resolviendo el sistema:

$$\mathbf{N^{10}_{H_2O} = 462.5} \qquad \mathbf{N^{6} = 952.5} \qquad \mathbf{x^{6}_{C_2H_4} = 0.07874}$$

$$\mathbf{x^{6}_{CO_2} = 0.0131233} \qquad \mathbf{x^{9}_{CO_2} = 0.015}$$

Continuando con los Balances:

O_2: $$85 = x^{6}_{O_2} \times 952.5$$

$$\mathbf{x^{6}_{O_2} = 0.08924}$$

Los resultados de comprueban en el Balance de N_2 o Balance Dependiente:

$$780 = (1 - 0.07874 - 0.08924 - 0.0131233) \times 952.5$$

$$780 = 780$$

Balances en el Agotador:

C_2H_4O: $$5\, N^{12} = 0.04 \times 500$$

$$\mathbf{N^{12} = 80}$$

CO_2: $$0.015 \times 500 = x^{12}_{CO_2} \times 80$$

$$\mathbf{x^{12}_{CO_2} = 0.09375}$$

H_2O: $$(1 - 0.04 - 0.015) \times 500 + N^{11}_{H_2O} = 462.5 + (1 - 0.25 - 0.09375) \times 80$$

$$\mathbf{N^{11}_{H_2O} = 42.5}$$

Comprobando en el Balance Total:

$$500 + 42.5 = 462.5 + 80$$

$$542.5 = 542.5$$

Por las restricciones del divisor:

$$\mathbf{x^{8}_{C_2H_4} = 0.07874} \qquad \mathbf{x^{8}_{O_2} = 0.08924} \qquad \mathbf{x^{8}_{CO_2} = 0.0131233}$$

Balances en el Mezclador:

CO_2: $$0.0131233 \times N^{8} = 0.01 \times 1000$$

$$\mathbf{N^{8} = 762}$$

C_2H_4: $$N^{1}_{C_2H_4} + 0.07874 \times 762 = 0.1 \times 1000$$

$$\mathbf{N^{1}_{C_2H_4} = 40}$$

O_2: $$N^{2}_{O_2} + 0.08924 \times 762 = 0.11 \times 1000$$

$$\mathbf{N^{2}_{O_2} = 42}$$

N_2: $$N^{3}_{N_2} = 780 - (1 - 0.08924 - 0.0131233 - 0.07874) \times 762$$

$$\mathbf{N^{3}_{N_2} = 156}$$

Los resultados se comprueban en el Balance Dependiente:

$$40 + 42 + 156 + 762 = 1000$$

$$1000 = 1000$$

Balances en el Divisor:

Total: $$952.5 = 762 + N^{7}$$

$$\mathbf{N^{7} = 190.5}$$

C_2H_4: $$0.07874 \times 952.5 = 0.07874 \times 762 + x^{7}_{C_2H_4} \times 190.5$$

$$\mathbf{x^{7}_{C_2H_4} = 0.07874}$$

O_2: $$0.08924 \times 952.5 = 0.08924 \times 762 + x^{7}_{O_2} \times 190.5$$

$$\mathbf{x^{7}_{O_2} = 0.08924}$$

CO_2: $$0.0131233 \times 952.5 = 0.0131233 \times 762 + x^{7}_{CO_2} \times 190.5$$

$$\mathbf{x^{7}_{CO_2} = 0.0131233}$$

Los resultados se comprueban con un Balance de Materia en Unidad Dependiente, los Balances Globales:

ENTRADA				**SALIDA**		
Sustancia	**Moles**	**Masa**		**Sustancia**	**Moles**	**Masa**
				C_2H_4O	20.0	880
				CO_2	7.5	330
C_2H_4	40.0	1120	Global	H_2O	52.5	945
O_2	42.0	1344		C_2H_4	15.0	420
N_2	156.0	4368		O_2	17.0	544
H_2O	42.5	765		CO_2	2.5	110
				N_2	156.0	4368
Total		**7597**		**Total**		**7597**

c. Calcule el N_2 diluyente necesario por mol de C_2H_4 alimentada al proceso.

$$\left(\frac{\mathbf{N_2\ diluyente}}{\mathbf{C_2H_4\ alimentado}}\right) = \left(\frac{\mathbf{N^{3}_{N_2}}}{\mathbf{N^{1}_{C_2H_4}}}\right) = \frac{\mathbf{156}}{\mathbf{40}} = \mathbf{3.9}$$

d. Calcule el rendimiento global de C_2H_4O a partir de C_2H_4 para el proceso.

$$\text{Rendimiento Global} = \left(\frac{N^{12}_{C_2H_4O}}{N_{C_2H_4O}\ \text{máximo}} \right) \times 100\,\%$$

$$\text{Rendimiento Global} = \left(\frac{20}{40} \right) \times 100 = 50\,\%$$

Valor que corresponde al porcentaje de C_2H_4O producido.

e. Calcule el rendimiento fraccional de C_2H_4O, tal como ocurre en el reactor mismo.

$$\text{Rendimiento Fraccional} = \left(\frac{N^{5}_{C_2H_4O}}{N_{C_2H_4O}\ (\text{máximo})} \right) \times 100\ \%$$

$$\text{Rendimiento Fraccinal} = \left(\frac{N^{5}_{C_2H_4O}}{0.25 \times 0.1\, N^{4}} \right) \times 100\,\% = \left(\frac{20}{25} \right) \times 100\,\% = 80\,\%$$

Valor que es el porcentaje del C_2H_4 que reacciona y forma óxido de etileno en el reactor.

Explique por qué son diferentes.

Los dos valores difieren porque no están referidos a las mismas cantidades de reactivos.

Resolviendo el problema utilizando el Programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX se plantean las ecuaciones del proceso:

Reactor:

Base de Cálculo: $N^4 = 1000$

De R_1: $N^5_{C_2H_4} = 0.75 \times 0.1\, N^4$ (1)

C_2H_4: $N^5_{C_2H_4} = 0.1\, N^4 - 2\, r_1 - r_2$ (2)

CO_2: $N^5_{CO_2} = 0.01\, N^4 + 2\, r_2$ (3)

H_2O: $N^5_{H_2O} = 2\, r_2$ (4)

De R_2: $N^5_{CO_2} = 2\, N^5_{H_2O}$ (5)

O_2: $$N_{O_2}^5 = 0.11 \times N^4 - r_1 - 3\,r_2 \quad (6)$$

N_2: $$N_{N_2}^5 = 0.78\,N^4 \quad (7)$$

C_2H_4O: $$N_{C_2H_4O}^5 = 2\,r_1 \quad (8)$$

$$N^5 = N_{C_2H_4}^5 + N_{O_2}^5 + N_{CO_2}^5 + N_{H_2O}^5 + N_{C_2H_4O}^5 + N_{N_2}^5 \quad (9)$$

Absorbedor:

C_2H_4O: $$0.04\ N^9 = N_{C_2H_4O}^5 \quad (10)$$

O_2: $$N_{CO_2}^5 = x_{CO_2}^6 N^6 + x_{CO_2}^9 N^9 \quad (11)$$

C_2H_4: $$N_{C_2H_4}^5 = x_{C_2H_4}^6 N^6 \quad (12)$$

De R_3: $$x_{C_2H_4}^6 = 6\,x_{CO_2}^6 \quad (13)$$

H_2O: $$N_{H_2O}^5 + N_{H_2O}^{10} = (1 - 0.04 - x_{CO_2}^9)\,N^9 \quad (14)$$

Total: $$N^5 + N_{H_2O}^{10} = N^6 + N^9 \quad (15)$$

O_2: $$N_{O_2}^5 = x_{O_2}^6 N^6 \quad (16)$$

De R_4: $$x_{O_2}^6 = x_{O_2}^8 \quad (17)$$

$$x_{CO_2}^6 = x_{CO_2}^8 \quad (18)$$

$$x_{C_2H_4}^6 = x_{C_2H_4}^8 \quad (19)$$

Agotador:

C_2H_4O: $$0.25\,N^{12} = 0.04 \times N^9 \quad (20)$$

CO_2: $$x_{CO_2}^9 N^9 = x_{CO_2}^{12} N^{12} \quad (21)$$

H_2O: $$(0.96 - x_{CO_2}^9)\,N^9 + N_{H_2O}^{11} = N_{H_2O}^{10} + (0.75 - x_{CO_2}^{12})\,N^{12} \quad (22)$$

Mezclador:

CO_2: $$x^{8}_{CO_2} N^{8} = 0.01 N^{4} \quad (23)$$

C_2H_4: $$N^{1}_{C_2H_4} + x^{8}_{C_2H_4} N^{8} = 0.1 N^{4} \quad (24)$$

O_2: $$N^{2}_{O_2} + x^{8}_{O_2} N^{8} = 0.11 N^{4} \quad (25)$$

N_2: $$0.78 N^{4} = N^{3}_{N_2} + (1 - x^{8}_{C_2H_4} - x^{8}_{O_2} - x^{8}_{CO_2}) N^{8} \quad (26)$$

Balances en el Divisor:

Total: $$N^{6} = N^{8} + N^{7} \quad (27)$$

C_2H_4: $$x^{6}_{C_2H_4} \times N^{6} = x^{8}_{C_2H_4} \times N^{8} + x^{7}_{C_2H_4} \times N^{7} \quad (28)$$

O_2: $$x^{6}_{O_2} \times N^{6} = x^{8}_{O_2} \times N^{8} + x^{7}_{O_2} \times N^{7} \quad (29)$$

CO_2: $$x^{6}_{CO_2} \times N^{6} = x^{8}_{CO_2} \times N^{8} + x^{7}_{CO_2} \times N^{7} \quad (30)$$

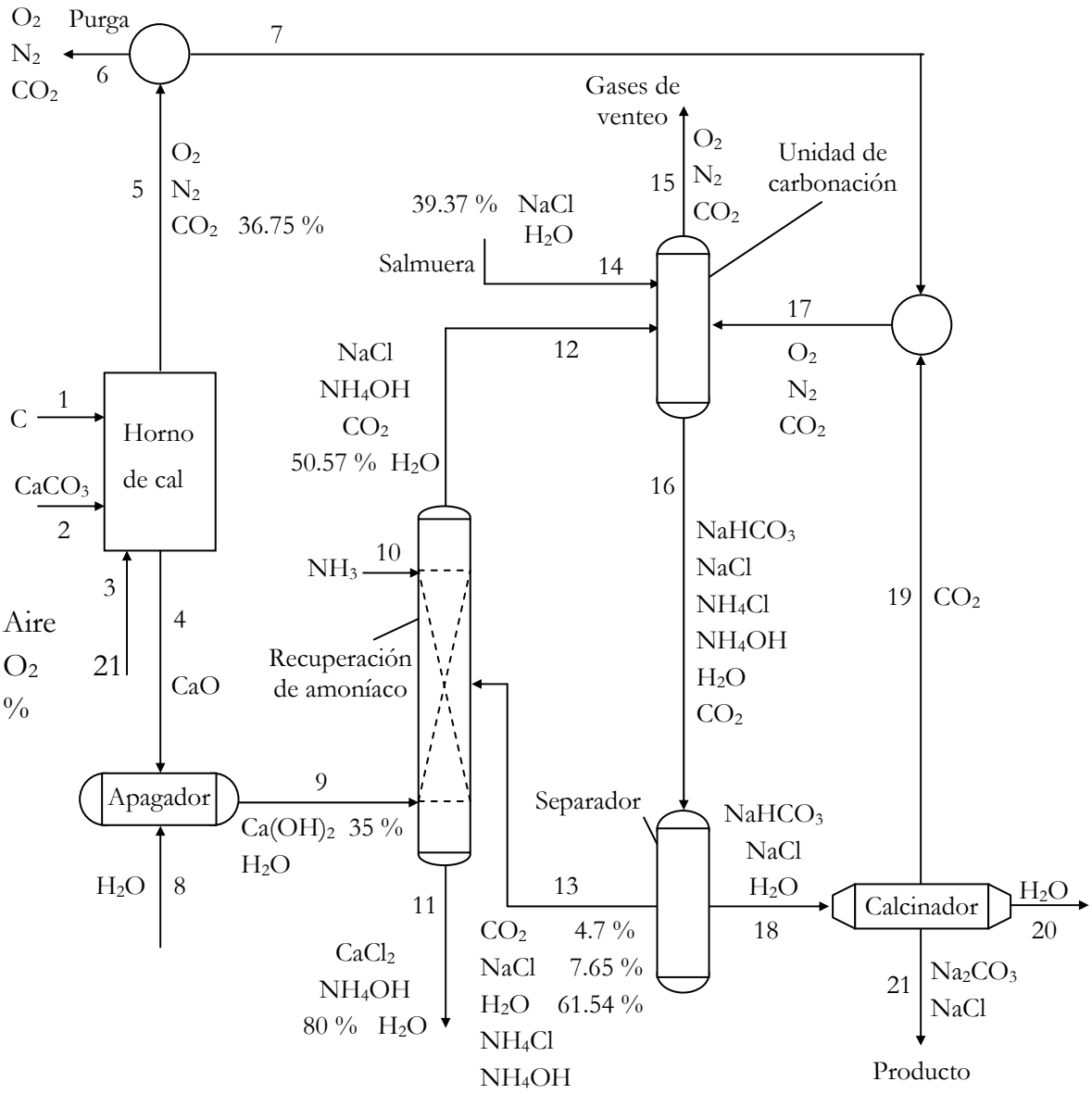
Resolviendo el sistema de 30 ecuaciones y 30 incógnitas, se obtiene:

$N^{10}_{H_2O} = 462.5$
$N^{11}_{H_2O} = 42.5$
$N^{12} = 80$
$N^{1}_{C_2H_4} = 40$
$N^{2}_{O_2} = 42$
$N^{3}_{N_2} = 156$
$N^{5} = 990$
$N^{5}_{C_2H_4} = 75$
$N^{5}_{C_2H_4O} = 20$
$N^{5}_{CO_2} = 20$

$N^{5}_{H_2O} = 10$
$N^{5}_{N_2} = 780$
$N^{5}_{O_2} = 85$
$N^{6} = 952.5$
$N^{7} = 190.5$
$N^{8} = 762$
$N^{9} = 500$
$r_1 = 10$
$r_2 = 5$
$x^{12}_{CO_2} = 0.09375$
$x^{6}_{C_2H_4} = 0.07874$

$x^{6}_{CO_2} = 0.0131233$
$x^{6}_{O_2} = 0.08924$
$x^{7}_{C_2H_4} = 0.07874$
$x^{7}_{CO_2} = 0.0131233$
$x^{7}_{O_2} = 0.08924$
$x^{8}_{C_2H_4} = 0.07874$
$x^{8}_{CO_2} = 0.0131233$
$x^{8}_{O_2} = 0.08924$
$x^{9}_{CO_2} = 0.015$

3.33. El importante producto químico industrial Na_2CO_3 se produce a partir de piedra caliza, $CaCO_3$, sal y coque, C usando el proceso Solvay.



En este ingenioso proceso, la reacción química hipotética:

$$CaCO_3 + 2\ NaCl \longrightarrow CaCl_2 + Na_2CO_3$$

que no ocurre bajo condiciones industrialmente aceptables, se efectúa indirectamente mediante una secuencia de reacciones en las que interviene amoniaco como producto intermedio.

En el diagrama de flujo mostrado en la figura, se carga coque (supuestamente 100% carbón) y piedra caliza (supuestamente $CaCO_3$ puro) a un horno, en proporción de 3 moles de C a 4 moles de $CaCO_3$.

En el horno, el carbón se quema completamente con aire (21 % de O_2 y 79 % de N_2):

$$C + O_2 \xrightarrow{r_1} CO_2$$

y proporciona el calor requerido para efectuar la descomposición térmica del $CaCO_3$:

$$CaCO_3 \xrightarrow{r_2} CaO + CO_2$$

Parte de los gases de descarga del horno, que contiene 36.75 % de CO_2, se purgan y el resto (63.25 %) se envían a la unidad de carbonación.

El residuo sólido del horno, que se supone contiene únicamente CaO, se hace reaccionar con agua en una unidad llamada "apagador" para producir una solución al 35 % de hidróxido de calcio, mediante la reacción así,

$$CaO + H_2O \xrightarrow{r_3} Ca(OH)_2$$

Esta solución de hidróxido reacciona en la unidad de recuperación de amoniaco con la recirculación de cloruro de amonio de la unidad de carbonación, para producir amoniaco y el subproducto $CaCl_2$:

$$2\ NH_4Cl + Ca(OH)_2 \xrightarrow{r_4} 2\ NH_3 + CaCl_2 + 2\ H_2O$$

La corriente de recirculación (corriente 13) contiene 4.7 % de CO_2 disuelto, 7.65% de NaCl, 61.54 % de H_2O y el resto de los compuestos de amonio.

La corriente de subproducto $CaCl_2$ también contiene 80 % de H_2O y una cantidad pequeña de NH_4OH.
Debido a esta perdida de amoniaco, deberá suministrarse al proceso algo de NH_3 de reposición. El consumo típico de NH_3 en la planta es de 1 mol de NH_3 por cada 17.5 moles de Na_2CO_3 producidas.

El NH_3 introducido, así como el NH_3 producido por la reacción, se hidrolizan inmediatamente a hidróxido de amonio en la unidad de recuperación de amoniaco.

$$NH_3 + H_2O \xrightarrow{r_5} NH_4OH$$

La corriente 12, de hidróxido de amonio concentrado (sólo 50.57 % de H_2O) proveniente de la unidad de recuperación, se introduce a la unidad de carbonación, en donde el hidróxido reacciona con el NaCl (que se alimenta como salmuera saturada que contiene 39.37 % de NaCl) y con un gas rico en CO_2 para producir $NaHCO_3$ mediante la reacción:

$$NH_4OH + CO_2 + NaCl \xrightarrow{r_6} NaHCO_3 + NH_4Cl$$

Los gases residuales de la unidad de carbonación se descargan a la atmósfera, en tanto que la lechada de producto, que contiene el precipitado de $NaHCO_3$, se envía a un subproceso de separación.

En la unidad de separación se filtra el bicarbonato y se lava en etapas, para producir una corriente de bicarbonato húmedo, que contiene bicarbonato y un poco de NaCl.

La corriente liquida residual de la unidad de separación se recircula a la unidad de recuperación de amoníaco, mientras que la corriente de bicarbonato húmedo se carga a un horno rotatorio, llamado calcinador, en donde se descompone térmicamente el bicarbonato para producir carbonato de sodio:

$$2\ NaHCO_3 \xrightarrow{r_7} Na_2CO_3 + CO_2 + H_2O$$

El producto sólido resultante contiene 2 moles de NaCl por cada 100 moles de carbonato de sodio. El CO_2 y H_2O eliminados en el calcinador, se enfrían para recuperar el H_2O por condensación. El CO_2 se mezcla con los gases de descarga del horno de piedra caliza, y se alimenta a la unidad de carbonación. Supóngase que todas las composiciones están en fracción mol o porcentaje en mol.

a. **Construya una tabla de Grados de Libertad y demuestre que el proceso esta especificado correctamente.**

b. **Describa el orden en que se deben efectuar los cálculos, para determinar todos los flujos y composiciones en el diagrama de flujo.**

c. **Calcule las moles de solución de $CaCl_2$ producidas (corriente 11) por mol de salmuera alimentada (corriente 14).**

SOLUCIÓN:

Relaciones:

R_1: $$\frac{N^2_{CaCO_3}}{N^1_C} = \frac{4}{3}$$

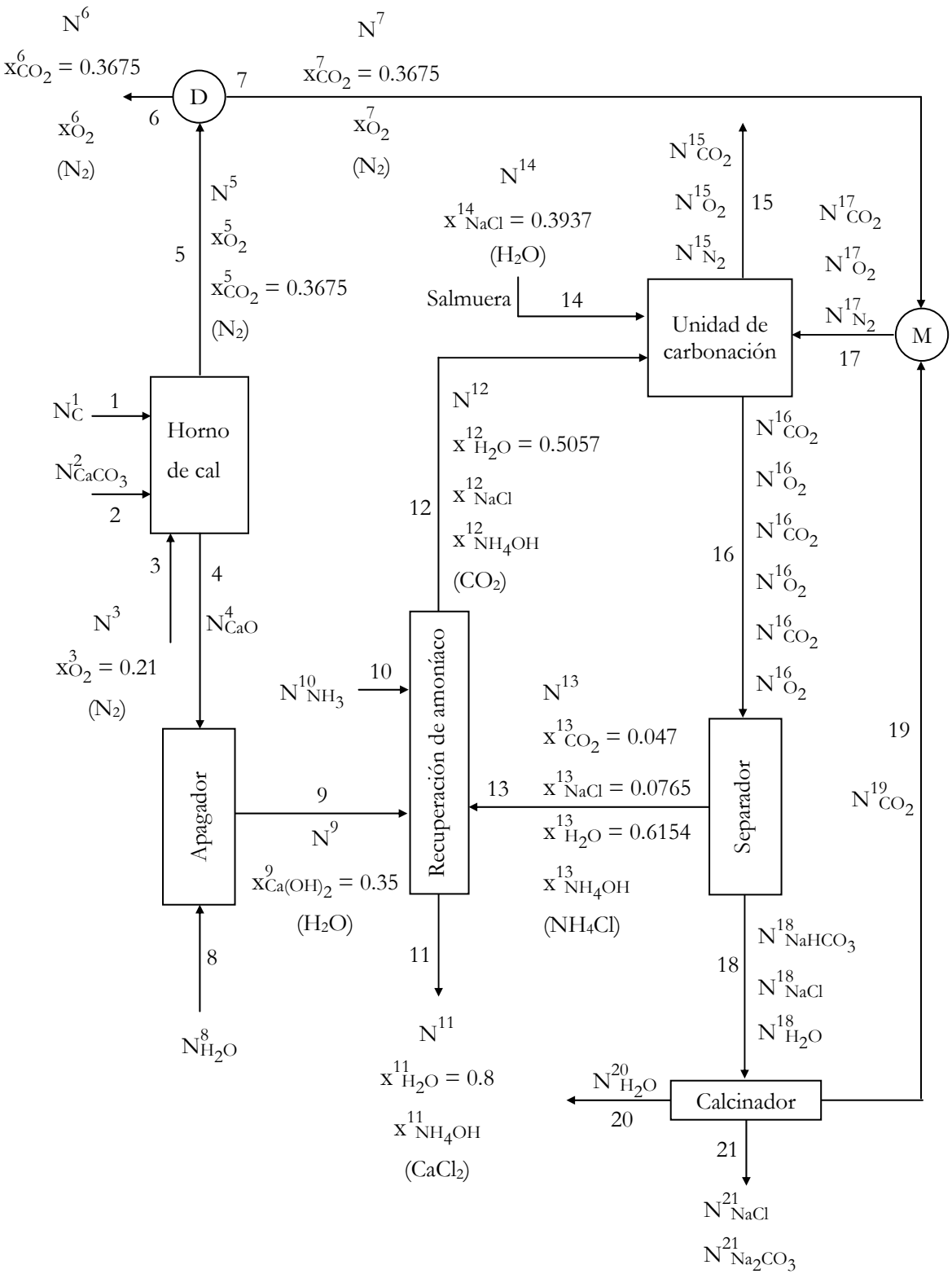
R_2: $$\frac{N^7}{N^6} = \frac{64}{36}$$

R_3: $$\frac{N^{21}_{Na_2CO_3}}{N^{10}_{NH_3}} = 17.5$$

R_4: $$\frac{N^{21}_{Na_2CO_3}}{N^{21}_{NaCl}} = 50$$

R_5: Restricciones del divisor $= (3 - 1)(2 - 1) = 2$

Diagrama cuantitativo:



a. Construya una tabla de Grados de Libertad y demuestre que el proceso está especificado correctamente.

Tabla de Grados de Libertad:

	Horno	**Apagador**	**Divisor**	**Recuperación de amoniaco**	**Separador**
NVI	8 + 2	4 + 1	9	15 + 2	14
NBMI	6	3	3	8	6
NCC	2	1	1	6	3
NRC R_1	1	–	–	–	–
R_2	–	–	1	–	–
R_3	–	–	–	–	–
R_4	–	–	–	–	–
R_5	–	–	2	–	–
G de L	**1**	**1**	**2**	**3**	**5**

	Unidad de carbonación	**Calcinador**	**Mezclador**	**Proceso**	**Global**
NVI	18 + 1	7 + 1	7	51 + 7	20 + 7
NBMI	8	5	3	42	15
NCC	2	0	1	9	4
NRC R_1	–	–	–	1	1
R_2	–	–	–	1	–
R_3	–	–	–	1	1
R_4	–	1	–	1	1
R_5	–	–	–	2	–
G de L	**9**	**2**	**3**	**1**	**5**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Horno: Incógnitas = 8 (N_C^1, $N_{CaCO_3}^2$, N^3, N_{CaO}^4, N^5, $x_{O_2}^5$, r_1, r_2)

Ecuaciones = 6 (balances) + 1 (R_1)

G de L = 1

Apagador: Incógnitas = 4 (N_{CaO}^4, $N_{H_2O}^8$, N^9, r_3)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 1

Divisor: Incógnitas = 8 (N^{5}, $x^{5}_{O_2}$, N^{6}, $x^{6}_{CO_2}$, $x^{6}_{O_2}$, N^{7}, $x^{7}_{CO_2}$, $x^{7}_{O_2}$)

Ecuaciones = 3 (balances) + 3 (R_2, R_5)

G de L = 2

Recuperación de amoníaco:

Incógnitas = 11 (N^{9}, $N^{10}_{NH_3}$, N^{11}, $x^{11}_{NH_4OH}$, N^{12}, x^{12}_{NaCl}, $x^{12}_{NH_4OH}$, N^{13}, $x^{13}_{NH_4OH}$, r_4, r_5)

Ecuaciones = 8 (balances)

G de L = 3

Separador: Incógnitas = 11 (N^{13}, $x^{13}_{NH_4OH}$, $N^{16}_{NaHCO_3}$, N^{16}_{NaCl}, $N^{16}_{NH_4Cl}$, $N^{16}_{NH_4OH}$, $N^{16}_{H_2O}$, $N^{16}_{CO_2}$, $N^{18}_{NaHCO_3}$, N^{18}_{NaCl}, $N^{18}_{H_2O}$)

Ecuaciones = 6 (balances)

G de L = 5

Unidad de Carbonación:

Incógnitas = 17 (N^{12}, x^{12}_{NaCl}, $x^{12}_{NH_4OH}$, N^{14}, $N^{15}_{N_2}$, $N^{15}_{O_2}$, $N^{15}_{CO_2}$, $N^{16}_{NaHCO_3}$, N^{16}_{NaCl}, $N^{16}_{NH_4Cl}$, $N^{16}_{NH_4OH}$, $N^{16}_{H_2O}$, $N^{16}_{CO_2}$, $N^{17}_{CO_2}$, $N^{17}_{N_2}$, $N^{17}_{O_2}$, r_6)

Ecuaciones = 8 (balances)

G de L = 9

Calcinador: Incógnitas = 8 ($N^{18}_{NaHCO_3}$, N^{18}_{NaCl}, $N^{18}_{H_2O}$, $N^{19}_{CO_2}$, $N^{20}_{H_2O}$, N^{21}_{NaCl}, $N^{21}_{Na_2CO_3}$, r_7)

Ecuaciones = 5 (balances) + 1 (R_4)

G de L = 2

Mezclador: Incógnitas = 6 (N^{7}, $x^{7}_{O_2}$, $N^{17}_{CO_2}$, $N^{17}_{N_2}$, $N^{17}_{O_2}$, $N^{19}_{CO_2}$)

Ecuaciones = 3 (balances)

G de L = 3

Globales: Incógnitas = 23 (N_C^1, $N_{CaCO_3}^2$, N^3, N^6, $x_{O_2}^6$, $N_{H_2O}^8$, $N_{NH_3}^{10}$, N^{11}, $x_{NH_4OH}^{11}$, N^{14}, $N_{N_2}^{15}$, $N_{O_2}^{15}$, $N_{CO_2}^{15}$, $N_{H_2O}^{20}$, N_{NaCl}^{21}, $N_{Na_2CO_3}^{21}$, r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6, r_7)

Ecuaciones = 15 (balances) + 3 (R_1, R_3, R_4)
G de L = 5

Tomando una Base de Cálculo el Proceso y dos Unidades quedan con 0 Grados de Libertad, por tanto está correctamente especificado.

Tabla de Balances:

	Horno	**Apagador**	**Divisor**	**Recuperación**	**Separador**
C	1	–	–	–	–
$CaCO_3$	1	–	–	–	–
O_2	1	–	1	–	–
N_2	1	–	1	–	–
CO_2	1	–	1	1	1
CaO	1	1	–	–	–
$Ca(OH)_2$	–	1	–	1	–
H_2O	–	1	–	1	1
NH_4Cl	–	–	–	1	1
NH_3	–	–	–	1	–
$CaCl_2$	–	–	–	1	–
NH_4OH	–	–	–	1	1
NaCl	–	–	–	1	1
$NaHCO_3$	–	–	–	–	1
Total	**6**	**3**	**3**	**8**	**6**

	Unidad de carbonación	**Calcinador**	**Mezclador**	**Proceso**	**Global**
C	–	–	–	1	1
$CaCO_3$	–	–	–	1	1
O_2	1	–	1	4	1
N_2	1	–	1	4	1
CO_2	1	1	1	7	1
CaO	–	–	–	2	1
$Ca(OH)_2$	–	–	–	2	1
H_2O	1	1	–	5	1
NH_4Cl	1	–	–	3	1
NH_3	–	–	–	1	1
$CaCl_2$	–	–	–	1	1
NH_4OH	1	–	–	3	1
NaCl	1	1	–	4	1
$NaHCO_3$	1	1	–	3	1
Na_2CO_3	–	1	–	1	1
Total	**8**	**5**	**3**	**42**	**15**

b. Describa el orden en que se deben efectuar los cálculos, para determinar todos los flujos y composiciones en el diagrama de flujo.

Estrategia de Solución:

1. Se toma Base de Cálculo en el Horno de Cal, quedando correctamente especificado éste y el Proceso. Se realizan los balances y se conoce N_C^1, N_{CaO}^4 , $N_{CaCO_3}^2$, N^3, N^5, $x_{O_2}^5$; ($x_{O_2}^6$, $x_{O_2}^7$ por arrastre en el Divisor), r_1 y r_2. Se agotan R_1 y los balances de C y $CaCO_3$.

2. Actualizando los Grados de Libertad:

   Apagador: G de L A = 1 – 1 (N_{CaO}^4) = 0

   Divisor: G de L A = 2 – 1 (N^5) – 1 ($x_{O_2}^5$) = 0

   Global: G de L A = 5 – 3 (N_C^1, $N_{CaCO_3}^2$, N^3) – 1 ($x_{O_2}^6$) – 2 (r_1, r_2)
   + 1 (R_1 agotada) + 2 (balances agotados) = 2

   Mezclador: G de L A = 3 – 1 ($x_{O_2}^7$) = 2

3. Resolviendo el Apagador se conoce: N^9, $N_{H_2O}^8$ y r_3. Se agota el balance de CaO.

4. Confirmando los Grados de Libertad del Divisor:

   Divisor: G de L A = 0 – 0 = 0

5. Resolviendo el Divisor se conoce: N^6 y N^7. Se agotan R_2 y R_5.

6. Actualizando los Grados de Libertad:

   Recuperación: G de L A = 3 – 1(N^9) = 2

   Mezclador: G de L A = 2 – 1(N^7) = 1

   Global: G de L A = 2 – 2 (N^6, $N_{H_2O}^8$) – 1 ($x_{O_2}^6$) – 1 (r_3) + 1 (CaO) = 0

7. Resolviendo los balances Globales se conoce: r_4, r_5, r_6, r_7, $N_{NH_3}^{10}$, N^{11}, $x_{NH_4OH}^{11}$, N^{14}, $N_{N_2}^{15}$, $N_{O_2}^{15}$, $N_{CO_2}^{15}$, $N_{H_2O}^{20}$, N_{NaCl}^{21}, $N_{Na_2CO_3}^{21}$. Se agotan R_3, R_4 y los balances de $Ca(OH)_2$, NH_3, $CaCl_2$, Na_2CO_3.

8. Actualizando los Grados de Libertad:

   Recuperación: G de L A = 2 – 2 ($N_{NH_3}^{10}$, N^{11}) – 1 ($x_{NH_4OH}^{11}$) – 2 (r_4, r_5)
   + 3 (balances agotados: $Ca(OH)_2$, NH_3, $CaCl_2$) = 0

   Calcinador: G de L A = 2 – 3 ($N_{H_2O}^{20}$, N_{NaCl}^{21}, $N_{Na_2CO_3}^{21}$) – 1 (r_7) + 1 (R_4 agotada)
   + 1 (balance agotado: Na_2CO_3) = 0

   Unidad de Carbonación:
   G de L A = 9 – 4 (N^{14}, $N_{N_2}^{15}$, $N_{O_2}^{15}$, $N_{CO_2}^{15}$) – 1 (r_6) = 4

9. Resolviendo los balances en la Recuperación de Amoniaco se conoce: N^{12}, x_{NaCl}^{12}, $x_{NH_4OH}^{12}$, N^{13}, $x_{NH_4OH}^{13}$.

10. Confirmando los Grados de Libertad en el Calcinador:
    Calcinador: G de L A = 0 – 0 = 0

11. Resolviendo los balances del Calcinador se conoce: $N^{18}_{NaHCO_3}$, N^{18}_{NaCl}, $N^{18}_{H_2O}$ y $N^{19}_{CO_2}$.

12. Actualizando los Grados de Libertad:
    Mezclador: G de L A = 1 – 1 ($N^{19}_{CO_2}$) = 0
    Separador: G de L A = 5 – 4 (N^{13}, $N^{18}_{NaHCO_3}$, N^{18}_{NaCl}, $N^{18}_{H_2O}$) – 1 ($x^{13}_{NH_4OH}$) = 0

13. Se resuelven los Balances del Mezclador y del Separador.

14. Los resultados se comprueban en la unidad dependiente, o sea la Unidad de Carbonación.

c. Calcule las moles de solución de $CaCl_2$ producidas (corriente 11) por mol de salmuera alimentada (corriente 14).

CÁLCULOS:

Balances en el Horno de Cal:

Las reacciones son:

$$C + O_2 \xrightarrow{r_1} CO_2$$

$$CaCO_3 \xrightarrow{r_2} CaO + CO_2$$

Base de Cálculo: $\mathbf{N^1_C = 150\ moles/h}$

De R_1: $3\ N^2_{CaCO_3} = 4 \times 150$

$$\mathbf{N^2_{CaCO_3} = 200}$$

C: $\mathbf{r_1 = 150}$

$CaCO_3$: $0 = 200 - r_2$

$$\mathbf{r_2 = 200}$$

CaO: $\mathbf{N^4_{CaO} = 200}$

CO_2: $0.3675\ N^5 = 150 + 200$

$$\mathbf{N^5 = 952.381}$$

O_2: $x^5_{O_2} \times 952.381 = 0.21\ N^3 - 150$ (1)

N_2: $(0.6325 - x^5_{O_2}) \times 952.381 = 0.79\ N^3$ (2)

Resolviendo las ecuaciones (1) y (2) se obtiene:

$$\mathbf{x^5_{O_2} = 0.0084} \qquad \mathbf{N^3 = 752.381}$$

Por las restricciones del divisor**:** $\mathbf{x^5_{O_2} = x^6_{O_2} = x^7_{O_2} = 0.0084}$

Además:

$$\mathbf{N^3_{O_2} = 158} \qquad \mathbf{N^3_{N_2} = 594.381} \qquad \mathbf{N^5_{CO_2} = 350}$$

$$\mathbf{N^5_{O_2} = 8} \qquad \mathbf{N^5_{N_2} = 594.381} \qquad \mathbf{x^5_{N_2} = 0.6241}$$

Balances en el Apagador:

La reacción es:

$$CaO + H_2O \xrightarrow{r_3} Ca(OH)_2$$

CaO: $\mathbf{r_3 = 200}$

$Ca(OH)_2$: $0.35\ N^9 = 200$

$$\mathbf{N^9 = 571.429}$$

Por tanto,

$$\mathbf{N^9_{Ca(OH)_2} = 200} \qquad \mathbf{N^9_{H_2O} = 371.429}$$

H_2O: $0.65 \times 571.429 = N^8_{H_2O} - 200$

$$\mathbf{N^8_{H_2O} = 571.429}$$

Balances en el Divisor:

De R_2: $36\ N^7 = 64\ N^6$ (1)

Total: $952.381 = N^6 + N^7$ (2)

Resolviendo las ecuaciones (1) y (2):

$$\mathbf{N^6 = 342.857} \qquad \mathbf{N^7 = 609.524}$$

Luego:

$$\mathbf{N^6_{CO_2} = 126} \qquad \mathbf{N^7_{CO_2} = 224} \qquad \mathbf{N^6_{O_2} = 2.88}$$

$$\mathbf{N^7_{O_2} = 5.12} \qquad \mathbf{N^6_{N_2} = 213.977} \qquad \mathbf{N^7_{N_2} = 380.404}$$

Balances Globales:

Las reacciones que ocurren en el proceso son:

$$C + O_2 \longrightarrow CO_2 \qquad r_1 = 150$$

$$CaCO_3 \longrightarrow CaO + CO_2 \qquad r_2 = 200$$

$$CaO + H_2O \longrightarrow Ca(OH)_2 \qquad r_3 = 200$$

$$2\ NH_4Cl + Ca(OH)_2 \longrightarrow 2\ NH_3 + CaCl_2 + 2\ H_2O \qquad r_4$$

$$NH_3 + H_2O \longrightarrow NH_4OH \qquad r_5$$

$$NH_4OH + CO_2 + NaCl \longrightarrow NaHCO_3 + NH_4Cl \qquad r_6$$

$$2\ NaHCO_3 \longrightarrow Na_2CO_3 + CO_2 + H_2O \qquad r_7$$

Los balances son:

N_2: $0.6241 \times 342.857 + N^{15}_{N_2} = 0.79 \times 752.381$

$$213.977 + N^{15}_{N_2} = 594.381$$

$$\mathbf{N^{15}_{N_2} = 380.404}$$

O_2: $0.0084 \times 342.857 + N^{15}_{O_2} = 0.21 \times 752.381 - 150$

$$\mathbf{N^{15}_{O_2} = 5.12}$$

$Ca(OH)_2$: $\mathbf{r_4 = 200}$

NH_4Cl: $\mathbf{r_6 = 400}$

$NaHCO_3$: $\mathbf{r_7 = 200}$

CO_2: $0.3675 \times 342.857 + N^{15}_{CO_2} = 150 + 200 - 400 + 200$

$$\mathbf{N^{15}_{CO_2} = 24}$$

Na_2CO_3: $\mathbf{N^{21}_{Na_2CO_3} = 200}$

De R_4: $\mathbf{200 = 50\, N^{21}_{NaCl}}$

$$\mathbf{N^{21}_{NaCl} = 4}$$

NaCl: $4 = 0.3937\, N^{14} - 400$

$$\mathbf{N^{14} = 1026.162}$$

De R_3: $200 = 17.5\, N^{10}_{NH_3}$

$$\mathbf{N^{10}_{NH_3} = 11.429}$$

NH_3: $1.429 + 2 \times 200 - r_5 = 0$

$$\mathbf{r_5 = 411.429}$$

NH_4OH: $$x^{11}_{NH_4OH}\ N^{11} = 411.429 - 400 \quad (1)$$

$CaCl_2$: $$(0.2 - x^{11}_{NH_4OH})\ N^{11} = 200 \quad (2)$$

Resolviendo las ecuaciones (1) y (2) simultáneamente:

$$\mathbf{x^{11}_{NH_4OH} = 0.01081} \qquad \mathbf{N^{11} = 1057.145}$$

H_2O: $$0.8 \times 1057.145 + N^{20}_{H_2O} = 571.429 + 0.6063 \times 1026.162 - 200 + 2 \times 200 - 411.429 + 200$$

$$\mathbf{N^{20}_{H_2O} = 336.446}$$

Balances en el Recuperador de Amoníaco:

Las reacciones son:

$$2\ NH_4Cl + Ca(OH)_2 \xrightarrow{r_4} 2\ NH_3 + CaCl_2 + 2\ H_2O$$

$$NH_3 + H_2O \xrightarrow{r_5} NH_4OH$$

Los balances son:

NH_4Cl: $$0 = (0.2611 - x^{13}_{NH_4OH})\ N^{13} - 2 \times 200 \quad (1)$$

H_2O: $$0.5057\ N^{12} = 0.6154\ N^{13} - 485.716 \quad (2)$$

NaCl: $$x^{12}_{NaCl}\ N^{12} = 0.0765\ N^{13} \quad (3)$$

CO_2: $$(1 - 0.5057 - x^{12}_{NH_4OH} - x^{12}_{NaCl})\ N^{12} = 0.047\ N^{13} \quad (4)$$

NH_4OH: $$x^{12}_{NH_4OH}\ N^{12} = x^{13}_{NH_4OH}\ N^{13} + 400 \quad (5)$$

Resolviendo el sistema de 5 ecuaciones con 5 incógnitas, se encuentra:

$$\mathbf{N^{12} = 1702.891} \qquad \mathbf{N^{13} = 2188.6} \qquad \mathbf{x^{12}_{NH_4OH} = 0.33557}$$

$$\mathbf{x^{12}_{NaCl} = 0.09832} \qquad \mathbf{x^{13}_{NH_4OH} = 0.07833}$$

Balances en el Calcinador:

La reacción es:

$$2\ NaHCO_3 \xrightarrow{r_7} Na_2CO_3 + CO_2 + H_2O$$

Los balances son:

$NaHCO_3$: $\mathbf{N^{18}_{NaHCO_3} = 400}$

NaCl: $\mathbf{N^{18}_{NaCl} = 4}$

H_2O: $\mathbf{N^{18}_{H_2O} = 136.446}$

CO_2: $\mathbf{N^{19}_{CO_2} = 200}$

Balances en el Mezclador:

O_2: $\mathbf{N^{17}_{O_2} = 5.120}$

CO_2: $0.3675 \times 609.524 + 200 = N^{17}_{CO_2}$

$$\mathbf{N^{17}_{CO_2} = 424}$$

Total: $609.524 + 200 = 424 + N^{17}_{N_2} + 5.120$

$$\mathbf{N^{17}_{N_2} = 380.404}$$

Balances en el Separador:

NaHCO: $\mathbf{N^{16}_{NaHCO_3} = 400}$

NaCl: $N^{16}_{NaCl} = 4 + 0.0765 \times 2188.6$

$\mathbf{N^{16}_{NaCl} = 171.428}$

H_2O: $N^{16}_{H_2O} = 136.446 + 0.6154 \times 2188.6$

$\mathbf{N^{16}_{H_2O} = 1483.31}$

CO_2: $N^{16}_{CO_2} = 0.047 \times 2188.6$

$\mathbf{N^{16}_{CO_2} = 102.864}$

NH_4OH: $N^{16}_{NH_4OH} = 0.07833 \times 2188.6$

$\mathbf{N^{16}_{NH_4OH} = 171.433}$

NH_4Cl: $0.18277 \times 2188.6 = N^{16}_{NH_4Cl}$

$\mathbf{N^{16}_{NH_4Cl} = 400}$

Los resultados se comprueban en el Balance de NaCl de la Unidad de Carbonación:

$$x^{12}_{NaCl} N^{12} + 0.3937 N^{14} - r_6 = N^{16}_{NaCl}$$

$$0.09832 \times 1702.891 + 0.3937 \times 1026.162 - 400 = 171.428$$

$$171.428 = 171.428$$

Por tanto:

$$\frac{\textbf{moles de solución de } \mathbf{CaCl_2}}{\textbf{mol de salmuera alimentada}} = \left(\frac{\mathbf{N^{11}}}{\mathbf{N^{14}}}\right) = \left(\frac{\mathbf{1057.145}}{\mathbf{1026.162}}\right) = \mathbf{1.0302}$$

Para resolver el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX, se plantean las ecuaciones del proceso, en el orden dado por la Estrategia de Solución:

Base de Cálculo: $\mathbf{N_C^1 = 150\ moles/h}$

Horno de Cal:

De R_1: $$3\,N_{CaCO_3}^2 = 4\,N_C^1 \quad (1)$$

C: $$0 = N_C^1 - r_1 \quad (2)$$

$CaCO_3$: $$0 = N_{CaCO_3}^2 - r_2 \quad (3)$$

CaO: $$N_{CaO}^4 = r_2 \quad (4)$$

CO_2: $$0.3675\,N^5 = r_1 + r_2 \quad (5)$$

O_2: $$x_{O_2}^5\,N^5 = 0.21\,N^3 - r_1 \quad (6)$$

N_2: $$(0.6325 - x_{O_2}^5)\,N^5 = 0.79\,N^3 \quad (7)$$

Apagador:

CaO: $$0 = N_{CaO}^4 - r_3 \quad (8)$$

$Ca(OH)_2$: $$0.35\,N^9 = r_3 \quad (9)$$

H_2O: $$0.65\,N^9 = N_{H_2O}^8 - r_3 \quad (10)$$

Divisor:

De R_2: $$36\,N^7 = 64\,N^6 \quad (11)$$

Total: $$N^5 = N^6 + N^7 \quad (12)$$

CO_2: $$0.3675\,N^5 = x_{CO_2}^6\,N^6 + x_{CO_2}^7\,N^7 \quad (13)$$

O_2: $$x_{O_2}^5\,N^5 = x_{O_2}^6\,N^6 + x_{O_2}^7\,N^7 \quad (14)$$

De R_5: $$0.3675 = x^{6}_{CO_2} \quad (15)$$

$$x^{5}_{O_2} = x^{6}_{O_2} \quad (16)$$

Globales:

N_2: $$(1 - 0.3675 - x^{6}_{O_2})\, N^{6} + N^{15}_{N_2} = 0.79\, N^{3} \quad (17)$$

O_2: $$x^{6}_{O_2}\, N^{6} + N^{15}_{O_2} = 0.21\, N^{3} - r_1 \quad (18)$$

$Ca(OH)_2$: $$0 = r_3 - r_4 \quad (19)$$

NH_4Cl: $$0 = r_6 - 2\, r_4 \quad (20)$$

$NaHCO_3$: $$0 = r_6 - 2\, r_7 \quad (21)$$

CO_2: $$0.3675\, N^{6} + N^{15}_{CO_2} = r_1 + r_2 - r_6 + r_7 \quad (22)$$

Na_2CO_3: $$N^{21}_{Na_2CO_3} = r_7 \quad (23)$$

De R_4: $$N^{21}_{Na_2CO_3} = 50\, N^{21}_{NaCl} \quad (24)$$

NaCl: $$N^{21}_{NaCl} = 0.3937\, N^{14} - r_6 \quad (25)$$

De R_3: $$N^{21}_{Na_2CO_3} = 17.5\, N^{10}_{NH_3} \quad (26)$$

NH_3: $$N^{10}_{NH_3} + 2\, r_4 - r_5 = 0 \quad (27)$$

NH_4OH: $$x^{11}_{NH_4OH}\, N^{11} = r_5 - r_6 \quad (28)$$

$CaCl_2$: $$(1 - 0.8 - x^{11}_{NH_4OH})\, N^{11} = r_4 \quad (29)$$

H_2O:

$$0.8\, N^{11} + N^{20}_{H_2O} = N^{8}_{H_2O} + (1 - 0.3937)\, N^{14} - r_3 + 2\, r_4 - r_5 + r_7 \quad (30)$$

Recuperador de Amoníaco:

NH_4Cl: $0 = (1 - 0.047 - 0.0765 - 0.6154 - x^{13}_{NH_4OH})\, N^{13} - 2\, r_4$ (31)

H_2O: $0.5057\, N^{12} + 0.8\, N^{11} = (1 - 0.35)\, N^{9} + 0.6154\, N^{13} + 2\, r_4 - r_5$ (32)

NH_4OH: $x^{11}_{NH_4OH}\, N^{11} + x^{12}_{NH_4OH}\, N^{12} = x^{13}_{NH_4OH}\, N^{13} + r_5$ (33)

NaCl: $x^{12}_{NaCl}\, N^{12} = 0.0765\, N^{13}$ (34)

CO_2: $(1 - 0.5057 - x^{12}_{NH_4OH} - x^{12}_{NaCl})\, N^{12} = 0.047\, N^{13}$ (35)

Calcinador:

$NaHCO_3$: $N^{18}_{NaHCO_3} = 2\, r_7$ (36)

NaCl: $N^{18}_{NaCl} = N^{21}_{NaCl}$ (37)

H_2O: $N^{20}_{H_2O} = N^{18}_{H_2O} + r_7$ (38)

CO_2: $N^{19}_{CO_2} = r_7$ (39)

Mezclador:

O_2: $x^{7}_{O_2}\, N^{7} = N^{17}_{O_2}$ (40)

CO_2: $x^{7}_{CO_2}\, N^{7} + N^{19}_{CO_2} = N^{17}_{CO_2}$ (41)

Total: $N^{7} + N^{19}_{CO_2} = N^{17}_{CO2} + N^{17}_{N_2} + N^{17}_{O_2}$ (42)

Separador:

NaHCO: $N^{18}_{NaHCO_3} = N^{16}_{NaHCO_3}$ (43)

NaCl: $N^{18}_{NaCl} + 0.0765 \times N^{13} = N^{16}_{NaCl}$ (44)

H_2O: $$N^{18}_{H_2O} + 0.6154 \times N^{13} = N^{16}_{H_2O} \quad (45)$$

CO_2: $$0.047\, N^{13} = N^{16}_{CO_2} \quad (46)$$

NH_4OH: $$x^{13}_{NH_4OH}\, N^{13} = N^{16}_{NH_4OH} \quad (47)$$

NH_4Cl: $$(0.2611 - x^{13}_{NH_4OH})\, N^{13} = N^{16}_{NH_4Cl} \quad (48)$$

Al resolver el sistema de 48 ecuaciones y 48 incógnitas, se encuentra:

$N^{10}_{NH_3} = 11.428571$
$N^{11} = 1057.142857$
$N^{12} = 1702.877979$
$N^{13} = 2188.592265$
$N^{14} = 1026.162052$
$N^{15}_{CO_2} = 24$
$N^{15}_{N_2} = 380.403809$
$N^{15}_{O_2} = 5.12$
$N^{16}_{CO_2} = 102.863836$
$N^{16}_{H_2O} = 1483.307446$
$N^{16}_{NH_4Cl} = 400$
$N^{16}_{NH_4OH} = 171.441440$
$N^{16}_{NaCl} = 171.427308$
$N^{16}_{NaHCO_3} = 400$
$N^{17}_{CO_2} = 424$
$N^{17}_{N_2} = 380.403809$
$N^{17}_{O_2} = 5.12$
$N^{18}_{H_2O} = 136.447767$
$N^{18}_{NaCl} = 4$
$N^{18}_{NaHCO_3} = 400$
$N^{19}_{CO_2} = 200$
$N^{20}_{H_2O} = 336.447767$
$N^{21}_{Na_2CO_3} = 200$
$N^{21}_{NaCl} = 4$
$N^{2}_{CaCO_3} = 200$
$N^{3} = 752.380952$
$N^{4}_{CaO} = 200$
$N^{5} = 952.380952$
$N^{6} = 342.857143$
$N^{7} = 609.523809$
$N^{8}_{H_2O} = 571.428571$
$N^{9} = 571.428571$
$r_1 = 150$
$r_2 = 200$
$r_3 = 200$
$r_4 = 200$
$r_5 = 411.428571$
$r_6 = 400$
$r_7 = 200$
$x^{11}_{NH_4OH} = 0.0108108$
$x^{12}_{NH_4OH} = 0.335574$
$x^{12}_{NaCl} = 0.0983202$
$x^{13}_{NH_4OH} = 0.0783341$
$x^{5}_{O_2} = 0.0084$
$x^{6}_{CO_2} = 0.3675$
$x^{6}_{O_2} = 0.0084$
$x^{7}_{CO_2} = 0.3675$
$x^{7}_{O_2} = 0.0084$

3.34. El importante producto químico intermedio acetaldehído puede producirse catalíticamente a partir de la oxidación parcial del eteno. La reacción principal es:

$$C_2H_6 + O_2 \longrightarrow C_2H_4O + H_2O$$

Sin embargo, existen varias reacciones paralelas que ocurren de manera significativa:

$$C_2H_6 + {}^{7}/_{2}\ O_2 \longrightarrow 2\ CO_2 + 3\ H_2O$$

$$C_2H_6 + {}^{3}/_{2}\ O_2 \longrightarrow CH_3OH + CO + H_2O$$

$$CH_3OH + {}^{1}/_{2}\ O_2 \longrightarrow CH_2O + H_2O$$

$$2\ CO + 3\ H_2O \longrightarrow C_2H_6 + {}^{5}/_{2}\ O_2$$

Para reducir la formación de estos subproductos diversos, el reactor debe operarse a una conversión baja de C_2H_6 y proporciones altas de C_2H_6 a O_2 en la alimentación al reactor. Por lo tanto, en el proceso debe usarse una razón de recirculación elevada y, debido a que se utiliza aire como fuente de oxígeno, debe tener una corriente de purga en la recirculación para eliminar el N_2 inerte. Para evitar perdidas valiosas de etano en la purga, en el diagrama de flujo de la figura se divide a la corriente de recirculación en dos partes iguales. Una parte se somete a una separación que eliminará preferencialmente una corriente de N_2, CO y CO_2 para descargarlos a la atmósfera. La otra mitad de la corriente de recirculación se envía directamente de regreso al reactor, sin tratamiento alguno. Supóngase que, bajo ciertas condiciones de operación, se observa que el gas de venteo, corriente 9, contiene iguales cantidades molares de CO y CO_2, la corriente de producto (corriente 5) contiene partes iguales de 33 $^1/_3$ % de C_2H_4O, 33 $^1/_3$ % de CH_3OH y 33 $^1/_3$ % de CH_2O, y la corriente de salida del reactor contiene 35 % de C_2H_6, 51 % de N_2, 1 % de C_2H_4O y 8.5 % combinado de CO y CO_2. También se observa que se forma un mol de H_2O en el proceso (corriente 6) por cada mol de C_2H_6 fresco alimentado al proceso (corriente 13). Todas las composiciones y condiciones adicionales están en unidades molares.

a. **Construya una tabla de Grados de Libertad y demuestre que el problema esta especificado correctamente.**

b. **Seleccione la ubicación de la base y proponga un orden de calculo unidad por unidad, que debería seguirse si se desea calcular todas las corrientes en el diagrama de flujo. Explique su razonamiento detalladamente.**

c. **Calcule el rendimiento global de C_2H_4O a partir de C_2H_6. El rendimiento global se define como:**

$$\text{Rendimiento Global} = \frac{\text{Velocidad global de producción de } C_2H_4O \text{ en la planta}}{\text{Velocidad global de producción de } C_2H_4O \text{ que podria alcanzarse si todo el } C_2H_4 \text{ convertido se usara exclusivamente para producir } C_2H_4O}$$

Para estos cálculos utilice una base de 12 mol/h de la corriente 5.

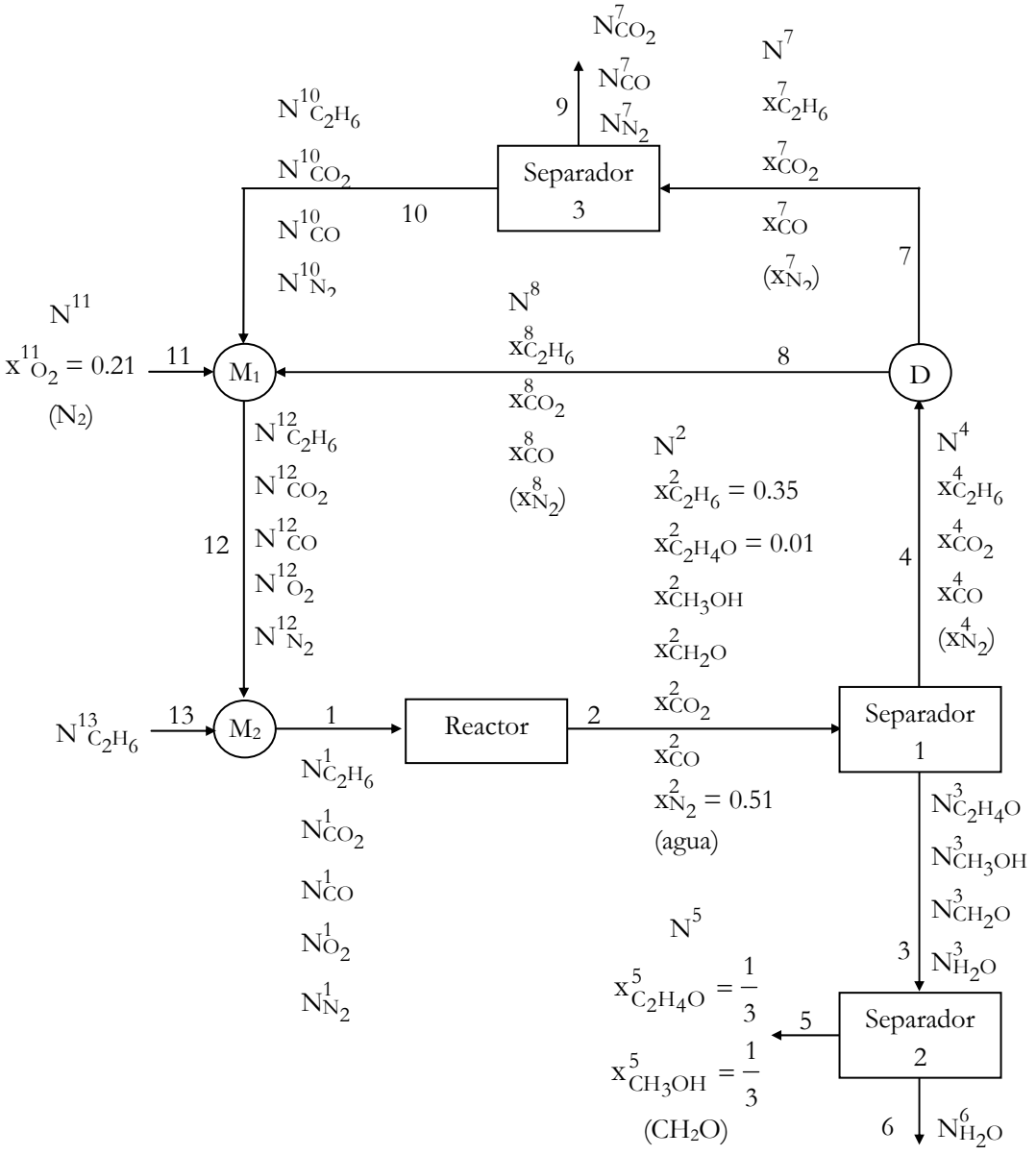
d. Suponga que al sistema dado anteriormente se agrega la reacción:

$$2\ CO + O_2 \longrightarrow 2\ CO_2$$

Tiene algún efecto esta reacción sobre los cálculos de balance ?. De ser así, cuál es el efecto ?. Explique detalladamente.

SOLUCIÓN:

Diagrama cuantitativo:



Relaciones:

R_1: $N^8 = N^7$ R_2: $N^9_{CO} = N^9_{CO_2}$

R_3: $x^2_{CO_2} + x^2_{CO} = 0.085$ R_4: $N^6_{H_2O} = N^{13}_{C_2H_6}$

R_5: Restricciones del divisor $= (4 - 1)(2 - 1) = 3$

Las reacciones del proceso son:

$$C_2H_6 + O_2 \xrightarrow{r_1} C_2H_4O + H_2O$$

$$C_2H_6 + \tfrac{7}{2}\,O_2 \xrightarrow{r_2} 2\,CO_2 + 3\,H_2O$$

$$C_2H_6 + \tfrac{3}{2}\,O_2 \xrightarrow{r_3} CH_3OH + CO + H_2O$$

$$CH_3OH + \tfrac{1}{2}\,O_2 \xrightarrow{r_4} CH_2O + H_2O$$

$$2\,CO + 3\,H_2O \xrightarrow{r_5} C_2H_6 + \tfrac{5}{2}\,O_2$$

a. Construya una tabla de Grados de Libertad y demuestre que el problema esta especificado correctamente.

La matriz de reacciones es:

	1a. Reacción	**2a. Reacción**	**3a. Reacción**	**4a. Reacción**	**5a. Reacción**
C_2H_6	–1	– 1	– 1	0	1
O_2	–1	$-\frac{7}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$
C_2H_4O	1	0	0	0	0
H_2O	1	3	1	1	– 3
CO_2	0	2	0	0	0
CH_3OH	0	0	1	– 1	0
CH_2O	0	0	0	1	0
CO	0	0	1	0	– 2

La matriz de reacciones reducida es:

C_2H_6	1	0	0	0	0
O_2	0	1	0	0	0
C_2H_4O	0	0	1	0	0
H_2O	0	0	0	1	0
CO_2	2	– 2	1	– 1	0
CH_3OH	0	0	0	0	1
CH_2O	– 3	0	– 2	– 1	– 2
CO	– 1	2	– 1	2	1

Ninguna columna se reduce a ceros, esto quiere decir que ninguna de las reacciones del proceso es dependiente.

Tabla de Grados de Libertad:

		Mezclador 1	**Mezclador 2**	**Reactor**	**Separador 1**
NVI		15	11	13 + 5	16
NBMI		5	5	9	8
NFC		0	0	0	0
NCC		1	0	3	3
NRC	R_1	–	–	–	–
	R_2	–	–	–	–
	R_3	–	–	1	1
	R_4	–	–	–	–
	R_5	–	–	–	–
G de L		**9**	**6**	**5**	**4**

		Separador 2	**Divisor**	**Separador 3**	**Proceso**	**Global**
NVI		8	12	11	48 + 5	10 + 5
NBMI		4	4	4	39	9
NFC		0	0	0	0	0
NCC		2	0	0	6	3
NRC	R_1	–	1	–	1	–
	R_2	–	–	1	1	1
	R_3	–	–	–	1	–
	R_4	–	–	–	1	1
	R_5	–	3	–	3	–
G de L		**2**	**4**	**6**	**1**	**1**

Reconfirmación de Grados de Libertad:

Mezclador 1: Incógnitas = 14 (N^{11}, N^{8}, $x^{8}_{C_2H_6}$, $x^{8}_{CO_2}$, x^{8}_{CO}, $N^{12}_{C_2H_6}$, N^{12}_{CO}, $N^{12}_{O_2}$, $N^{12}_{N_2}$, $N^{12}_{CO_2}$, $N^{10}_{N_2}$, $N^{10}_{CO_2}$, $N^{10}_{C_2H_6}$, N^{10}_{CO})

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 9

Mezclador 2: Incógnitas = 11 ($N^{13}_{C_2H_6}$, $N^{12}_{C_2H_6}$, N^{12}_{CO}, $N^{12}_{O_2}$, $N^{12}_{N_2}$, $N^{12}_{CO_2}$, $N^{1}_{N_2}$, $N^{1}_{CO_2}$, $N^{1}_{C_2H_6}$, N^{1}_{CO}, $N^{1}_{O_2}$)

Ecuaciones = 5 (balances)

G de L = 6

Reactor: Incógnitas = 15 ($N^{1}_{CO_2}$, $N^{1}_{C_2H_6}$, N^{1}_{CO}, $N^{1}_{O_2}$, $N^{1}_{N_2}$, N^{2}, $x^{2}_{CH_3OH}$, $x^{2}_{CH_2O}$, $x^{2}_{CO_2}$, $x^{2}_{C\ O}$, r_1, r_2, r_3, r_4, r_5)

Ecuaciones = 9 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 5

Separador 1: Incógnitas = 13 (N^{2}, $x^{2}_{CH_3OH}$, $x^{2}_{CH_2O}$, $x^{2}_{CO_2}$, x^{2}_{CO}, $N^{3}_{C_2H_4O}$, $N^{3}_{CH_3OH}$, $N^{3}_{CH_2O}$, $N^{3}_{H_2O}$, N^{4}, $x^{4}_{C_2H_6}$, $x^{4}_{CO_2}$, x^{4}_{CO})

Ecuaciones = 8 (balances) + 1 (R_3)

G de L = 4

Separador 2: Incógnitas = 6 ($N^{3}_{C_2H_4O}$, $N^{3}_{CH_3OH}$, $N^{3}_{CH_2O}$, $N^{3}_{H_2O}$, N^{5}, $N^{6}_{H_2O}$)

Ecuaciones = 4 (balances)

G de L = 2

Divisor: Incógnitas = 12 (N^4, $x^4_{C_2H_6}$, $x^4_{CO_2}$, x^4_{CO}, N^8, $x^8_{C_2H_6}$, $x^8_{CO_2}$, x^8_{CO}, N^7, $x^7_{C_2H_6}$, $x^7_{CO_2}$, x^7_{CO})

Ecuaciones = 4 (balances) + 4 (R_1, R_5)

G de L = 4

Separador 3: Incógnitas = 11 ($N^9_{N_2}$, N^9_{CO}, $N^9_{CO_2}$, N^7, $x^7_{C_2H_6}$, $x^7_{CO_2}$, x^7_{CO}, $^{10}_{C_2H_6}$, N^{10}_{CO}, $N^{10}_{N_2}$, $N^{10}_{CO_2}$)

Ecuaciones = 4 (balances) + 1 (R_2)

G de L = 6

Global: Incógnitas = 12 (r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, $N^9_{N_2}$, N^9_{CO}, $N^9_{CO_2}$, N^5, $N^6_{H_2O}$, N^{11}, $N^{13}_{C_2H_6}$)

Ecuaciones = 9 (balances) + 2 (R_2, R_4)

G de L = 1

El proceso está correctamente especificado.

Tabla de Balances:

	Mezclador 1	**Mezclador 2**	**Reactor**	**Separador 1**
C_2H_6	1	1	1	1
O_2	1	1	1	–
C_2H_4O	–	–	1	1
H_2O	–	–	1	1
CO_2	1	1	1	1
CH_3OH	–	–	1	1
CO	1	1	1	1
CH_2O	–	–	1	1
N_2	1	1	1	1
Total	**5**	**5**	**9**	**8**

	Separador 2	**Divisor**	**Separador 3**	**Proceso**	**Global**
C_2H_6	–	1	1	6	1
O_2	–	–	–	3	1
C_2H_4O	1	–	–	3	1
H_2O	1	–	–	3	1
CO_2	–	1	1	6	1
CH_3OH	1	–	–	3	1
CO	–	1	1	6	1
CH_2O	1	–	–	3	1
N_2	–	1	1	6	1
Total	**4**	**4**	**4**	**39**	**9**

b. Seleccione la ubicación de la Base de Cálculo y proponga un orden de calculo unidad por unidad, que debería seguirse si se desea calcular todas las corrientes en el diagrama de flujo.

Explique su razonamiento detalladamente.

Estrategia de Solución:

1. Tomando como Base de Cálculo cualquiera de las corrientes 5, 6, 9, 11 o 13. Sea N^5.

2. Se resuelven los balances en Globales y se obtiene $N^9_{N_2}$, $N^9_{CO,}$ $N^9_{CO_2,}$ N^{11}, $N^{13}_{C_2H_6}$, $N^6_{H_2O}$, r_1, r_2, r_3, r_4 y r_5. Se agotan R_2 y R_4.

3. Actualizando los Grados de Libertad:
   Mezclador 1: G de L A = 9 – 1 (N^{11}) = 8
   Mezclador 2: G de L A = 6 – 1 ($N^{13}_{C_2H_6}$) = 5
   Separador 2: G de L A = 2 – 2 ($N^6_{H_2O}$, N^5) = 0
   Separador 3: G de L A = 6 – 3 ($N^9_{N_2}$, N^9_{CO}, $N^9_{CO_2}$) + 1 (R_2 agotada) = 4
   Reactor: G de L A = 5 – 5 (r_1, r_2, r_3, r_4, r_5) = 0

4. Resolviendo los balances en el Separador 2 se obtienen $N^3_{C_2H_4O}$, $N^3_{CH_3OH}$, $N^3_{CH_2O}$, $N^3_{H_2O}$.

5. Reconfirmando los Grados de Libertad del Reactor:
   Reactor: G de L A = 0 – 0 = 0

6. Resolviendo los balances en el Reactor se obtiene N^2, $x^2_{CH_3OH}$, $x^2_{CH_2O}$, $x^2_{CO_2,}$ x^2_{CO}, $N^1_{CO_2}$, $N^1_{C_2H_6}$, N^1_{CO}, $N^1_{O_2}$, $N^1_{N_2}$. Se agotan R_3 y los balances de C_2H_4O, H_2O, CH_3OH, CH_2O.

7. Actualizando los Grados de Libertad:

   Mezclador 2: G de L A = 5 – 5 ($N^1_{CO_2}$, $N^1_{C_2H_6}$, N^1_{CO}, $N^1_{O_2}$, $N^1_{N_2}$) = 0

   Separador 1: G de L A = 4 – 5 (N^2, $N^3_{C_2H_4O}$, $N^3_{CH_3OH}$, $N^3_{CH_2O}$, $N^3_{H_2O}$)
   – 4 ($x^2_{CH_3OH}$, $x^2_{CH_2O}$, $x^2_{CO_2}$, x^2_{CO}) + 1 (R_2 Agotada)
   + 4 (balances agotados) = 0

8. Resolviendo los balances en el Separador 1 se obtiene N^4, $x^4_{C_2H_6}$, $x^4_{CO_2}$, x^4_{CO}.

9. Reconfirmando los Grados de Libertad del mezclador:

   Mezclador 2: G de L A = 0 – 0 = 0

10. Resolviendo los balances en el Mezclador 2 se obtiene $N^{12}_{C_2H_6}$, N^{12}_{CO}, $N^{12}_{O_2}$, $N^{12}_{N_2}$, $N^{12}_{CO_2}$. Se agota el balance de O_2.

11. Actualizando los Grados de Libertad:

    Divisor: G de L A = 4 – 1 (N^4) – 3 ($x^4_{C_2H_6}$, $x^4_{CO_2}$, x^4_{CO}) = 0

    Mezclador 1: G de L A = 8 – 5 ($N^{12}_{C_2H_6}$, N^{12}_{CO}, $N^{12}_{O_2}$, $N^{12}_{N_2}$, $N^{12}_{CO_2}$)
    + 1 (balance agotado: O_2) = 4

12. Resolviendo los balances en el Divisor se obtiene N^7, $x^7_{C_2H_6}$, $x^7_{CO_2}$, x^7_{CO} N^8, $x^8_{C_2H_6}$, $x^8_{CO_2}$, x^8_{CO}. Se agota R_1.

13. Actualizando los Grados de Libertad:

    Mezclador 1: G de L A = 4 – 1 (N^8) – 3 ($x^8_{C_2H_6}$, $x^8_{CO_2}$, x^8_{CO}) = 0

    Separador 3: G de L A = 4 – 1 (N^7) – 3 ($x^7_{C_2H_6}$, $x^7_{CO_2}$, x^7_{CO}) = 0

14. Se resuelven los balances en el Separador 3 y compruebo los resultados en el Mezclador 1.

Nota: La relación 3 se cambia por: $x^2_{CO_2} = x^2_{CO}$ pues sin este cambio el problema no se podría resolver completamente y este tipo de problemas no los resuelve el programa **Solvesys** de la HP – 48 GX.

CÁLCULOS:

Balances Globales:

Base de Cálculo: **N^5 = 12 moles/h**

Las reacciones son:

$$C_2H_6 + O_2 \xrightarrow{r_1} C_2H_4O + H_2O$$

$$C_2H_6 + \tfrac{7}{2}\, O_2 \xrightarrow{r_2} 2\, CO_2 + 3\, H_2O$$

$$C_2H_6 + \tfrac{3}{2}\,O_2 \xrightarrow{r_3} CH_3OH + CO + H_2O$$

$$CH_3OH + \tfrac{1}{2}\,O_2 \xrightarrow{r_4} CH_2O + H_2O$$

$$2\,CO + 3\,H_2O \xrightarrow{r_5} C_2H_6 + \tfrac{5}{2}\,O_2$$

Los balances son:

C_2H_4O: $\quad \tfrac{1}{3} \times 12 = r_1$

$$\mathbf{r_1 = 4}$$

CH_2O: $\quad (1 - \tfrac{1}{3} - \tfrac{1}{3}) \times 12 = r_4$

$$\mathbf{r_4 = 4}$$

CH_3OH: $\quad \tfrac{1}{3} \times 12 = r_3 - 4$

$$\mathbf{r_3 = 8}$$

R_4: $\quad N^{6}_{H_2O} = N^{13}_{C_2H_6} \qquad (1)$

R_2: $\quad N^{9}_{CO} = N^{9}_{CO_2} \qquad (2)$

C_2H_6: $\quad 0 = N^{13}_{C_2H_6} - 4 - r_2 - 8 + r_5$

$$12 = N^{13}_{C_2H_6} - r_2 + r_5 \qquad (3)$$

CO: $\quad N^{9}_{CO} = 8 - 2\,r_5 \qquad (4)$

CO_2: $\quad N^{9}_{CO_2} = 2\,r_2 \qquad (5)$

H_2O: $\quad N^{6}_{H_2O} = 4 + 3\,r_2 + 8 + 4 - 3\,r_5$

$$N^{6}_{H_2O} = 16 + 3\,r_2 - 3\,r_5 \qquad (6)$$

Resolviendo el sistema de 6 ecuaciones con 6 incógnitas, se tiene:

$$\mathbf{r_2 = 1} \qquad \mathbf{r_5 = 3} \qquad \mathbf{N^6_{H_2O} = 10}$$

$$\mathbf{N^{13}_{C_2H_6} = 10} \qquad \mathbf{N^9_{CO_2} = 2} \qquad \mathbf{N^9_{CO} = 2}$$

Continuando con los Balances:

O_2: $\quad 0 = 0.21\, N^{11} - 4 - {}^7/_2 - {}^3/_2 \times 8 - {}^1/_2 \times 4 + {}^5/_2 \times 3$

$$\mathbf{N^{11} = 66.667}$$

N_2: $\quad N^9_{N_2} = 0.79\, N^{11}$

$$\mathbf{N^9_{N_2} = 52.667}$$

Balances en el Separador 2:

H_2O: $\quad \mathbf{N^3_{H_2O} = 10}$

C_2H_4O: $\quad \mathbf{N^3_{C_2H_4O} = 4}$

CH_3OH: $\quad \mathbf{N^3_{CH_3OH} = 4}$

CH_2O: $\quad \mathbf{N^3_{CH_2O} = 4}$

Balances en el Reactor:

C_2H_4O: $\quad 0.01\, N^2 = 4$

$$\mathbf{N^2 = 400}$$

C_2H_6: $$0.35 \times 400 = N^1_{C_2H_6} - 4 - 1 - 8 + 3$$

$$\mathbf{N^1_{C_2H_6} = 150}$$

N_2: $$0.51 \times 400 = N^1_{N_2}$$

$$\mathbf{N^1_{N_2} = 204}$$

O_2: $$0 = N^1_{O_2} - 4 - {}^7/_2 - {}^3/_2 \times 8 - \tfrac{1}{2} \times 4 + {}^5/_2 \times 3$$

$$\mathbf{N^1_{O_2} = 14}$$

CH_3OH: $$x^2_{CH_3OH} \times 400 = 8 - 4$$

$$\mathbf{x^2_{CH_3OH} = 0.01}$$

CH_2O: $$x^2_{CH_2O} \times 400 = 4$$

$$\mathbf{x^2_{CH_2O} = 0.01}$$

R_3: $$x^2_{CO_2} = x^2_{CO} \qquad (1)$$

H_2O: $$(0.11 - x^2_{CO_2} - x^2_{CO}) \times 400 = 10 \qquad (2)$$

Resolviendo las ecuaciones (1) y (2):

$$\mathbf{x^2_{CO_2} = 0.0425} \qquad \mathbf{x^2_{CO} = 0.0425}$$

CO: $$0.0425 \times 400 = N^1_{CO} + 8 - 2 \times 3$$

$$\mathbf{N^1_{CO} = 15}$$

CO_2: $$0.0425 \times 400 = N^1_{CO_2} + 2$$

$$\mathbf{N^1_{CO_2} = 15}$$

Balances en el Separador 1:

CO_2: $17 = x^4_{CO_2} N^4$ (1)

CO: $17 = x^4_{CO} N^4$ (2)

C_2H_6: $140 = x^4_{C_2H_6} N^4$ (3)

N_2: $204 = (1 - x^4_{CO_2} - x^4_{CO} - x^4_{C_2H_6}) N^4$ (4)

Resolviendo simultáneamente las 4 ecuaciones:

$$\mathbf{x^4_{CO_2} = 0.04497} \qquad \mathbf{x^4_{CO} = 0.04497}$$

$$\mathbf{x^4_{C_2H_6} = 0.3704} \qquad \mathbf{N^4 = 378}$$

Balances en el Mezclador 2:

C_2H_6: $\mathbf{N^{12}_{C_2H_6} = 140}$

CO_2: $\mathbf{N^{12}_{CO_2} = 15}$

CO: $\mathbf{N^{12}_{CO} = 15}$

O_2: $\mathbf{N^{12}_{O_2} = 14}$

N_2: $\mathbf{N^{12}_{N_2} = 204}$

Balances en el Divisor:

Total: $$378 = N^{7} + N^{8} \quad (1)$$

De R_1: $$N^{8} = N^{7} \quad (2)$$

Resolviendo simultáneamente las ecuaciones (1) y (2):

$$\mathbf{N^{7} = 189} \qquad \mathbf{N^{8} = 189}$$

De R_5, Restricciones del Divisor:

$$\mathbf{x^{7}_{CO_2} = 0.04497} \qquad \mathbf{x^{7}_{CO} = 0.04497} \qquad \mathbf{x^{7}_{C_2H_6} = 0.3704}$$

CO_2: $$0.04497 \times 378 = 0.04497 \times 189 + x^{8}_{CO_2} \times 189$$

$$\mathbf{x^{8}_{CO_2} = 0.04497}$$

CO: $$0.04497 \times 378 = 0.04497 \times 189 + x^{8}_{CO} \times 189$$

$$\mathbf{x^{8}_{CO} = 0.04497}$$

C_2H_6: $$0.3704 \times 378 = 0.3704 \times 189 + x^{8}_{C_2H_6} \times 189$$

$$\mathbf{x^{8}_{C_2H_6} = 0.3704}$$

Balances en el Separador 3:

CO_2: $$8.5 = 2 + N^{10}_{CO_2}$$

$$\mathbf{N^{10}_{CO_2} = 6.5}$$

CO: $$8.5 = 2 + N^{10}_{CO}$$

$$\mathbf{N^{10}_{CO} = 6.5}$$

C_2H_6: $$\mathbf{N^{10}_{C_2H_6} = 70}$$

N_2: $$102 = 52.667 + N^{10}_{N_2}$$

$$\mathbf{N^{10}_{N_2} = 49.333}$$

Comprobando en los Balances del Mezclador 1:

C_2H_6: $$N^{12}_{C_2H_6} = x^{8}_{C_2H_6} N^{8} + N^{10}_{C_2H_6}$$

$$140 = 70 + 70 = 140$$

O_2: $$N^{12}_{O_2} = x^{11}_{O_2} N^{11}$$

$$14 = 0.21 \times 66.667 = 14$$

CO_2: $$N^{12}_{CO_2} = x^{8}_{CO_2} N^{8} + N^{10}_{CO_2}$$

$$15 = 8.5 + 6.5 = 15$$

CO: $$N^{12}_{CO} = x^{8}_{CO} N^{8} + N^{10}_{CO}$$

$$15 = 8.5 + 6.5 = 15$$

N_2: $$N^{12}_{N_2} = (1 - x^{8}_{C_2H_6} - x^{8}_{CO_2} - x^{8}_{CO}) N^{8} + N^{10}_{N_2} + 0.79 N^{11}$$

$$204 = 102 + 49.333 + 52.667 = 204$$

Para resolver el problema utilizando el programa **Solvesys** de la calculadora HP – 48 GX se plantean las ecuaciones del proceso en el orden definido por la Estrategia de Solución:

Base de Cálculo: $\mathbf{N^5 = 12\ moles/h}$

Globales:

C_2H_4O: $$^1/_3\, N^5 = r_1 \quad (1)$$

CH_2O: $$(1 - {}^1/_3 - {}^1/_3)\, N^5 = r_4 \quad (2)$$

CH_3OH: $$^1/_3\, N^5 = r_3 - r_4 \quad (3)$$

R_4: $$N^6_{H_2O} = N^{13}_{C_2H_6} \quad (4)$$

R_2: $$N^9_{CO} = N^9_{CO_2} \quad (5)$$

C_2H_6: $$0 = N^{13}_{C_2H_6} - r_1 - r_2 - r_3 + r_5 \quad (6)$$

CO: $$N^9_{CO} = r_3 - 2\, r_5 \quad (7)$$

CO_2: $$N^9_{CO_2} = 2\, r_2 \quad (8)$$

H_2O: $$N^6_{H_2O} = r_1 + 3\, r_2 + r_3 + r_4 - 3\, r_5 \quad (9)$$

O_2: $$0 = 0.21\, N^{11} - r_1 - {}^7/_2\, r_2 - {}^3/_2\, r_3 - {}^1/_2\, r_4 + {}^5/_2\, r_5 \quad (10)$$

N_2: $$N^9_{N_2} = 0.79\, N^{11} \quad (11)$$

Separador 2:

H_2O: $$N^6_{H_2O} = N^3_{H_2O} \quad (12)$$

C_2H_4O: $$^1/_3\, N^5 = N^3_{C_2H_4O} \quad (13)$$

CH_3OH: $$^1/_3\, N^5 = N^3_{CH_3OH} \quad (14)$$

CH_2O: $$(1 - {}^1/_3 - {}^1/_3)\, N^5 = N^3_{CH_2O} \quad (15)$$

Reactor:

C_2H_4O: $$0.01\,N^2 = r_1 \quad (16)$$

C_2H_6: $$0.35\,N^2 = N^1_{C_2H_6} - r_1 - r_2 - r_3 + r_5 \quad (17)$$

N_2: $$0.51\,N^2 = N^1_{N_2} \quad (18)$$

O_2: $$0 = N^1_{O_2} - r_1 - {}^7\!/_2\, r_2 - {}^3\!/_2\, r_3 - \tfrac{1}{2}\, r_4 + {}^5\!/_2\, r_5 \quad (19)$$

CH_3OH: $$x^2_{CH_3OH}\,N^2 = r_3 - r_4 \quad (20)$$

CH_2O: $$x^2_{CH_2O}\,N^2 = r_4 \quad (21)$$

R_3: $$x^2_{CO_2} = x^2_{CO} \quad (22)$$

H_2O: $$(0.13 - x^2_{CH_3OH} - x^2_{CH_2O} - x^2_{CO_2} - x^2_{CO})\,N^2 = r_1 + 3\,r_2 + r_3 + r_4 - 3\,r_5 \quad (23)$$

CO: $$x^2_{CO}\,N^2 = N^1_{CO} + r_3 - 2\,r_5 \quad (24)$$

CO_2: $$x^2_{CO_2}\,N^2 = N^1_{CO_2} + 2\,r_2 \quad (25)$$

Separador 1:

CO_2: $$x^2_{CO_2}\,N^2 = x^4_{CO_2}\,N^4 \quad (26)$$

CO: $$x^2_{CO}\,N^2 = x^4_{CO}\,N^4 \quad (27)$$

C_2H_6: $$0.35\,N^2 = x^4_{C_2H_6}\,N^4 \quad (28)$$

N_2: $$0.51\,N^2 = (1 - x^4_{CO_2} - x^4_{CO} - x^4_{C_2H_6})\,N^4 \quad (29)$$

Mezclador 2:

C_2H_6: $$N^1_{C_2H_6} = N^{13}_{C_2H_6} + N^{12}_{C_2H_6} \quad (30)$$

CO_2: $$N^1_{CO_2} = N^{12}_{CO_2} \quad (31)$$

CO: $$N^1_{CO} = N^{12}_{CO} \quad (32)$$

O_2: $$N_{O_2}^{1} = N_{O_2}^{12} \quad (33)$$

N_2: $$N_{N_2}^{1} = N_{N_2}^{12} \quad (34)$$

Divisor:

Total: $$N^{4} = N^{7} + N^{8} \quad (35)$$

De R_1: $$N^{8} = N^{7} \quad (36)$$

De R_5: $$x_{CO_2}^{4} = x_{CO_2}^{7} \quad (37)$$

$$x_{CO}^{4} = x_{CO}^{7} \quad (38)$$

$$x_{C_2H_6}^{4} = x_{C_2H_6}^{7} \quad (39)$$

CO_2: $$x_{CO_2}^{4} N^{4} = x_{CO_2}^{7} N^{7} + x_{CO_2}^{8} N^{8} \quad (40)$$

CO: $$x_{CO}^{4} N^{4} = x_{CO}^{7} N^{7} + x_{CO}^{8} N^{8} \quad (41)$$

C_2H_6: $$x_{C_2H_6}^{4} N^{4} = x_{C_2H_6}^{7} N^{7} + x_{C_2H_6}^{8} N^{8} \quad (42)$$

Separador 3:

CO_2: $$x_{CO_2}^{7} N^{7} = N_{CO_2}^{9} + N_{CO_2}^{10} \quad (43)$$

CO: $$x_{CO_2}^{7} N^{7} = N_{CO}^{9} + N_{CO}^{10} \quad (44)$$

C_2H_6: $$x_{C_2H_6}^{7} N^{7} = N_{C_2H_6}^{10} \quad (45)$$

N_2: $$(1 - x_{CO_2}^{7} - x_{CO}^{7} - x_{C_2H_6}^{7}) N^{7} = N_{N_2}^{9} + N_{N_2}^{10} \quad (46)$$

Resolviendo el sistema de 46 ecuaciones y 46 incógnitas se obtiene:

$N^{10}_{C_2H_6} = 70$
$N^{10}_{CO} = 6.5$
$N^{10}_{CO_2} = 6.5$
$N^{10}_{N_2} = 49.3333$
$N^{11} = 66.6667$
$N^{12}_{C_2H_6} = 140$
$N^{12}_{CO} = 15$
$N^{12}_{CO_2} = 15$
$N^{12}_{N_2} = 204$
$N^{12}_{O_2} = 14$
$N^{13}_{C_2H_6} = 10$
$N^{1}_{C_2H_6} = 150$
$N^{1}_{CO} = 15$
$N^{1}_{CO_2} = 15$
$N^{1}_{N_2} = 204$

$N^{1}_{O_2} = 14$
$N^{2} = 400$
$N^{3}_{C_2H_4O} = 4$
$N^{3}_{CH_2O} = 4$
$N^{3}_{CH_3OH} = 4$
$N^{3}_{H_2O} = 10$
$N^{4} = 378$
$N^{6}_{H_2O} = 10$
$N^{7} = 189$
$N^{8} = 189$
$N^{9}_{CO} = 2$
$N^{9}_{CO_2} = 2$
$N^{9}_{N_2} = 52.6667$
$r_1 = 4$
$r_2 = 1$
$r_3 = 8$

$r_4 = 4$
$r_5 = 3$
$x^{2}_{CH_2O} = 0.01$
$x^{2}_{CH_3OH} = 0.01$
$x^{2}_{CO} = 0.0425$
$x^{2}_{CO_2} = 0.0425$
$x^{4}_{C_2H_6} = 0.3703704$
$x^{4}_{CO} = 0.044973545$
$x^{4}_{CO_2} = 0.044973545$
$x^{7}_{C_2H_6} = 0.3703704$
$x^{7}_{CO} = 0.044973545$
$x^{7}_{CO_2} = 0.044973545$
$x^{8}_{C_2H_6} = 0.3703704$
$x^{8}_{CO} = 0.044973545$
$x^{8}_{CO_2} = 0.044973545$

c. Calcule el rendimiento global de C_2H_4O a partir de C_2H_6. El rendimiento global se define como:

$$\text{Rendimiento Global} = \left(\frac{x^{5}_{C_2H_4O} N^{5}}{N^{13}_{C_2H_6}} \right) \times 100\ \%$$

$$\text{Rendimiento Global} = \left(\frac{4}{10} \right) \times 100\ \% = 40\ \%$$

d. Suponga que al sistema dado anteriormente se agrega la reacción:

$$2\ CO + O_2 \longrightarrow 2\ CO_2$$

¿Tiene algún efecto esta reacción sobre los cálculos de balance?. De ser así ¿cuál es el efecto?. Explique detalladamente.

Si se agrega la reacción, el sistema no se ve afectado porque esta reacción es dependiente. Para demostrarlo se construye la matriz de reacciones:

	1a. Reacción	**2a. Reacción**	**3ª. Reacción**	**4a. Reacción**	**5a. Reacción**	**6a. Reacción**
C_2H_6	–1	– 1	– 1	0	1	0
O_2	–1	$-\frac{7}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$	– 1
C_2H_4O	1	0	0	0	0	0
H_2O	1	3	1	1	– 3	0
CO_2	0	2	0	0	0	2
CH_3OH	0	0	1	– 1	0	0
CH_2O	0	0	0	1	0	0
CO	0	0	1	0	– 2	– 2

La matriz de reacciones reducida es:

C_2H_6	1	0	0	0	0	0
O_2	0	1	0	0	0	0
C_2H_4O	0	0	1	0	0	0
H_2O	0	0	0	1	0	0
CO_2	2	– 2	1	– 1	0	0
CH_3OH	0	0	0	0	1	0
CH_2O	– 3	0	– 2	– 1	– 2	0
CO	– 1	2	– 1	2	1	0

Puede concluirse que la reacción agregada es dependiente.